

コンピュータが創る新しい化学 : 次世代自動車技術へのインパクト

著者	宮本 明
URL	http://hdl.handle.net/10097/53669

コンピュータが創る新しい化学 -次世代自動車技術へのインパクト-

東北大学
未来科学技術共同研究センター
工学研究科化学工学専攻

宮本 明



Acknowledgment

宮本 明(1947年5月3日生(新憲法施行の日))

- 1963.4 国立鈴鹿工業高等専門学校入学(2期生)
- 1968.3 同校工業化学科卒業
- 1968.4 東北大学工学部応用化学科編入学(1期生)
- 1975.3 同大学工学研究科博士課程修了(化学工学専攻)
- 1975.4 名古屋大学工学部合成化学科助手
- 1985.5 京都大学工学部石油化学科助教授
- 1992.4 東北大学工学部分子化学工学科教授
(工学研究科(材料化学専攻、応用化学専攻、化学工学専攻))
- 2002.4 同大学未来科学技術共同研究センター教授
- 2008-2011 同大学ディステイングイシュット教授
- 2009-2011 同大学未来科学技術共同研究センター長
- 2012.3 同大学定年退職予定

- ・ 幼稚園・保育園、小学校、中学校、高校

これまで人類が培ってきた知識、文化などを学ぶ

- ・ 大学・大学院

これまで人類が培ってきた知識、文化などをさらに深く学ぶ

新しい学問を創る

宮本 明

東北大学未来科学技術共同研究センター・
工学研究科化学工学専攻

1967-1989(23年間)

(鈴鹿高専、東北大学、名古屋大学、京都大学)

実験化学: 固体触媒を中心とする実験研究

環境保護のための触媒化学

1987-2012(25年間)

(京都大学、東北大学)

コンピュータ化学: コンピュータ支援による分子設計・
材料設計

産業革新のための新しい化学

憲法が施行されて3日で、まる50年になる。施行の日に生まれた同い年の人たちに、ともに「戦後」を過ごしてきた憲法についての思いを語ってもらった。

施行日生まれの50歳にきく

憲法50歳とともに育った

環境保護で理念生かす

宮本 明さん

東北大教授



東北大の博士課程を終えて一九七五年に名古屋大の助手になった。教授から与えられたテーマは、火力発電所から出る有害物質を取り除く触媒の研究だった。光化学スモッグや四日市ぜんそくなど公害が社会問題になっていた時代でも、モノ作りに直接結びつかない環境保護のための研究は傍流だった。それを生涯のテーマにしていけるのだろうか。迷った時、憲法の施行日に生まれた偶然を意識した。「平和憲法の理念を技術に生かすのが自分の使命」と考え、迷いが吹っ切れた。

四月二十一日にあった今年度最初の講義で、空中窒素の固定技術について話した。農業用肥料に貢献した

技術が一方で、爆薬の原料も作り出し、ドイツが第一次世界大戦に参戦する引き金にもなった。「技術を扱う我々に求められるのは、倫理性だと思う」。約百四十人の学生に語りかけた。平和で安全な技術に徹すること、日本独自の先進的研究を模索したいと思う。

宮本 明

東北大学未来科学技術共同研究センター・
工学研究科化学工学専攻

1967-1989(23年間)

(鈴鹿高専、東北大学、名古屋大学、京都大学)

実験化学: 固体触媒を中心とする実験研究

環境保護のための触媒化学

1987-2012(25年間)

(京都大学、東北大学)

コンピュータ化学: コンピュータ支援による分子設計・
材料設計

産業革新のための新しい化学

コンピュータ ケミストリーに かける夢

宮 本 明



Akira MIYAMOTO 東北
大学大学院工学研究科教
授。1975年東北大学大
学院工学研究科化学工学
専攻博士課程修了、工学
博士。75年名古屋大学工学部助手、80年京大
工学部助教授、92年東北大学工学部教授。
代表的な著書：『新体系化学工学計算機化学工
学』（オーム社）、『原子・分子で理解する固体
表面現象』（培風館）。趣味：旅行、飲酒、読
書。新軍法施行日（1947年5月3日）の誕生日。
高専からの東北大学編入一浪生など私的に、
新しいことに邁り合う幸運に恵まれている。通
絡先：960-8579 仙台市青葉区愛宕字青葉 07
（勤務先）

1 コンピュータケミストリーとは

コンピュータケミストリーは、コンピュータの
もつ計算機能、情報処理能力、可視化機能などを
活用しつつ、多様な物質、材料を原子・分子レベ
ルでモデル化し、量子力学、古典力学、統計熱力
学等の理論をもとにシミュレーションすることによ
り、化学にかかわる種々の現象の解析、予測を
行う学問である。20年くらい前にドラッグデザイ
ンから出発し、現在では、触媒、高分子、無機機
能材料など多様な分野への応用が図られている。

2 背水の陣で臨んだ新分野 —もともとは実験屋であった

1992年4月、名古屋大学助手、京都大学助教授
を経て、母校東北大学教授として、新しい研究室
を担当することになった。学生時代から教官時代
のほとんどを、多様な固体触媒の実験研究に打ち
込んできたが、新しい研究室では、すべての力を
コンピュータケミストリーに注ぐために、まず、
学生時代の思い出の残る全ての実験装置を廃棄
し、そこに、わずか1台のワークステーションと、
数台のパソコンを設置した。当時の苦労語は「ド
キュメント：新しい研究室をつくる—研究室の運
営はこんなに大変」¹⁾に描かれている。

背水の陣で臨めば、意外に活路が開けるものだ
ある。自分の夢に、多くの人が共感と支援をくだ

さった。内には、スタッフ、学生が、期待
をはるかに超えた活躍してくれた。外には、
産官学のリーダーがわれわれの研究を力強く
支援してくれた。おかげで、何とか新分野を立ち
上げることができたが、これからの夢も大きい。
そのいくつかを紹介させていただく。

3 コンビナトリアル計算化学 —解釈から予測へ

1年半ほど前に、量子化学でPople教授と
Kohn教授がノーベル化学賞を受賞したが、これ
は、学問の歴史のなかでも極めて意義あることと
思っている。周期表のすべての元素の集合体を高
速に精度よく計算できる時代が到来したのであ
る。それにより、理論化学のもつ意義が飛躍的に
高まり、化学の方法論が、21世紀を境に、大きく
変貌することが予想される。

その結果、例えば、従来は実験的に臆慄（じゅ
うたん）爆発的なスクリーニングを行ってきた
が、これからは、コンピュータケミストリーを活
用する高速スクリーニング手法がターゲットとな
る。われわれは、これをコンビナトリアル計算化
学と名づけているが、その夢を実現するために、
現在よりもっと高速かつ正確な計算手法の開
発、種々の新しいソフトウェア開発、専用チップ、
実験ロボットなど新しい課題に取り組んでいる。

4 物づくりのノウハウをソフトウェアに —新時代の化学の発展を支える

化学のような物づくりの分野では、これまでは徒弟主義的な技術伝承が第一とされてきた。そのため、小・中・高校では暗記ものの科目として、とすると意欲的な学生にその魅力を提供できないでいた。また、大学や企業でも、変化への対応が遅れ気味になる理由になってきたように思える。

化学は知恵である。具体的な物で勝負するとともに、それらのもつ多様性をソフトウェアとして実現して、多彩な分野への化学の活用を促進したい。化学は、既存の化学分野だけでなく、電子工学、機械工学、あるいは文系分野にも活用が広がってきている。これまでに、可視化ソフト、トライボロジー用ソフト、分離膜研究用ソフト、結晶成長シミュレーションソフト、リチウム電池シミュレーション、高速量子分子力学ソフト、吸着シミュレーションソフトなど独自ソフトを開発、そのうちいくつかを市販してきたが、今後はもっともっと多くの有用なソフトを開発してゆきたい。

よいソフトをつくるには、よい実験研究者との連携が不可欠である。世界的にみても、オリジナルな技術を担う実験グループの最先端課題にコンピュータケミストリーの立場から取り組むことにより、世界中のどこにもないような先進的なソフトウェアが実現される。

5 高齢者活用型社会への切り札 —日本の新しいオリジナルを目指す

第2次世界大戦のあと、日本は戦争放棄、平和主義を世界に宣言し、科学、技術の平和利用に専念、民生用を中心とする技術分野で高い競争力を誇ってきた。また、70年代、80年代にあっては、

狭い国土のためいち早く顕在化した公害問題、環境問題に真剣に取り組む、世界に冠たる日本の環境、省資源、省エネルギー技術を育んできた。

今、世界史的にみて、日本がもっている最大の課題でありチャンスは、高齢化問題である。日本は、男女とも世界最高の長寿を誇っている。とすると介護、年金問題など負の面が強調されることが多いが、逆に、ここで、世界を先導する日本の新しいオリジナルを構築したい。

具体的には、これまで、触媒開発などの実験研究に携わって定年を迎えた人には、コンピュータケミストリーに携わっていただき、新しい視点から自分の研究開発内容を深めてほしい。最も詳しくその系のことを知っており、また最も愛着のある人が、コンピュータケミストリーにおいても最も意味のある仕事ができるはずである。現在のコンピュータケミストリーは、全くコンピュータのことを知らない人でも研究を始められるようになってきている。また、もともとの理論化学研究者には、若手研究者、学生とともに、それらをぜひ、斬新なソフトウェアとして実現してほしい。コンピュータケミストリーは、このような高齢者活用型技術社会構築への切り札になるはずであると信じて、ここ何年か研究室運営を進めているが、実際に大きな成果をあげている。

6 新しいパラダイムへの挑戦

コンピュータケミストリーは、化学の長い歴史に比べるとほんの最近の進展なので、まだまだ十分な発展を遂げていないが、そのぶん、解釈から設計への展開がもたらすコンビナトリアル計算化学、高齢化社会への対応、小・中・高校生向けの化学教育など未来への夢は尽きない。

文 献

- 1) 宮本 明, 化学, 48, 237 (1993).

研究目標

コンピュータ化学を、基礎
の学術領域だけに止める
ことなく、産業革新のため
の新しい学問、強力な手
法にまで育む



Collaborators



Prof. A. Miyamoto
 Assoc. Prof. H. Takaba
 Assoc. Prof. A. Endou
 Assoc. Prof. N. Hatakeyama
 Assoc. Prof. H. Tsuboi
 Assist. Prof. A. Suzuki
 Assist. Prof. R. Miura
 Assist. Prof. R. Nagumo
 Sen. Res. Fellow. T. Yotsuyanagi
 Visit. Prof. H. Koinuma
 Sen. Res. Fellow. T. Inoue
 Visit. Prof. T. Omori
 Visit. Prof. H. Fukui
 Visit. Prof. K. Nishijima
 Visit. Prof. O. Okada
 Visit. Prof. M. Ippommatsu
 Visit. Prof. M. C. Williams
 Visit. Prof. J. Amano
 Visit. Assoc. Prof. N. Aoki
 Visit. Assoc. Prof. M. Shibata
 Visit. Assoc. Prof. H. Sato
 Visit. Assoc. Prof. E. Kaneko
 Visit. Assoc. Prof. K. Itaka

Collaborators

Prof. M. Kubo, Assoc. Prof. T. Tokumasu
 Prof. T. Ikeshoji, and other 6 members

Researcher	2
Techn. Staff	32
Secretaries	5
Students	25
Ph.D.	10
M.Sc.	8
B.Sc.	6
Res. Student	1
(incl. 10 foreign members)	
Part-time	
Programmer	53

Laboratory of Combinatorial
 Computational Chemistry
 (Endowed Chair)



New Industry Creation
 Hatchery Center

Department of
 Chemical Engineering



Total 150 members

産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学

実践的計算化学：産業革新のための新しい化学の方法論を目指して

東北大学未来科学技術
共同研究センター
教授 宮本 明

1967年～1989年

鈴鹿高専、東北大学、
名古屋大学、京都大学
・固体触媒を中心と
する実験研究

1987年～現在

京都大学、東北大学
・コンピュータ支援による
分子設計・材料設計



産学連携と学術発展の実践的融合 (東北大NICHe宮本研モデル)

産業課題の実践的解決と多額の民間資金の獲得

- ・現実課題に役立つ独自の計算化学ソフトウェアの開発
- ・開発ソフトウェアの市販化による資金獲得と新規産業の創出
- ・持続可能な組織運営の実現

経済的価値

知的価値

産学連携
の推進

社会的・
文化的価値

新規学問領域の創生と
若手リーダーの育成

- ・世界最先端の研究教育環境
- ・次世代の研究の発展
- ・次世代の教育者
- ・競争的資金の獲得

社会貢献

- ・地域雇用の創出
- ・外国人研究者受入による
国際交流
- ・産業界の人材養成
- ・社会人の再教育

産学連携と学術発展の実践的合 の推進体制の確立

Leader: 宮本 明(教授)

中核メンバー:

(准教授) 高羽洋充、遠藤 明、畠山 望、坪井秀行
(助教) 鈴木 愛、三浦隆治、南雲 亮

宮本研究室の多数のスタッフ

客員教授・准教授: 15人

顧問: 3人

協力研究員: 10人

研究員: 2人

技術補佐員: 28人

秘書: 5人

学生: 28人

社会人博士: 3人

博士課程: 9人

修士課程: 9人

学士課程: 5人

研究生: 1人

Part time Programmer: 45人

合計 142人(2010. 8.1)



未来科学技術
共同研究センター



化学工学専攻
化学システム
工学分野



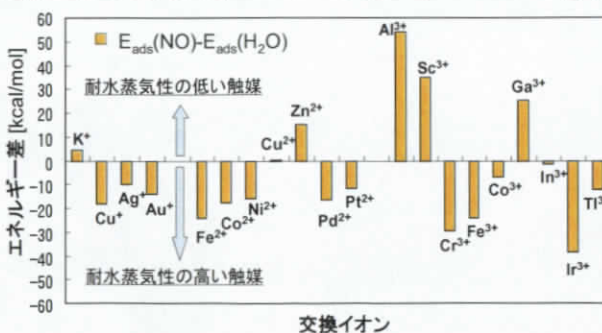
コンビナトリアル
計算化学寄附講座

プロジェクトリーダーによる 「コンビナトリアル計算化学」の提唱

IrZSM-5ーコンビナトリアル計算化学に よって設計された新触媒

戦略的産業分野における 実践的計算化学研究者の養成

触媒の耐水蒸気性をNOと水の吸着エネルギー差で評価

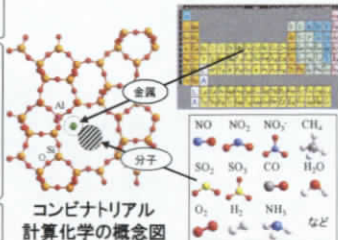


Pd、Fe、Coなどが高い耐水蒸気性を持つことは以前の実験結果と一致し、新触媒としてIr-ZSM-5が設計された。この予測の後にIr触媒の有効性が早稲田大学により実験的に実証された。

戦略的 産業分野	人材養成の 対象者	講義カリキュラム
エレクトロニクス材料 半導体材料	民間の第一線で 働く実験研究者	システマティックな講義と演習カリキュ ラムにより基礎知識を習得
触媒材料 電池材料	半導体企業 電機企業 化学企業 自動車企業 機械企業 重工業企業 石油企業 電力企業 ガス企業 医薬品企業 ソフトウェア企業 など多数	on the Job Training エレクトロニクス、触媒、エネルギー、 バイオ、機械など各企業の課題に 応じた個別指導、個別演習
環境材料 エネルギー材料		インターネットを最大限に活用 各企業に居ながら宮本研究室の最 新の講義・演習資料の入手、最新 プログラムやコンピュータを活用
セラミックス材料 バイオ・有機材料		加速度的人材育成 養成した研究者が企業にて計算化学 者を加速度的に養成することが可能
トライボロジー材料 機械技術		○日本の国際競争力の大幅な飛躍 ○新しい市場・産業の創出

コンビナトリアルケミストリー

1回の合成実験で化合物を1つ作る
従来法に対し、試薬の組み合わせ
と反応場の制御により100～10000
以上の化合物を系統的に合成し、
目的とする化合物を高速かつ効率
的に探索することを可能にした。



コンビナトリアル
計算化学の概念図

コンビナトリアル計算化学

「コンビナトリアルケミストリー」の
概念を計算化学に導入
周期表のありとあらゆる元素の機
能を計算化学により高速に予測
することで、計算化学を材料開発
のための高速スクリーニング手法
として活用する新しい方法論。

計算化学による高速スクリーニング

高速スクリーニングを実現するための様々
なソフトウェアを開発し、市販化している。

日本企業が国際競争力を回復するために
最も必要な技術として認識されつつある。

開発元：東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室
〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-10
TEL: 022-795-7233, FAX: 022-795-7235, E-mail: miyamoto@aki.che.tohoku.ac.jp
問い合わせ先：ペガサスソフトウェア株式会社
〒104-0032 東京都中央区八丁堀4丁目2番2号共同ビル5階
TEL: 03-3553-7211, FAX: 03-3553-7212
問い合わせ先：株式会社菱化システム
〒104-0033 東京都中央区新川11-28-38 東京ダイヤビル3号館3階
TEL: 03-3553-9206, FAX: 03-3553-9207

開発元：東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室
〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-10
TEL: 022-795-7233, FAX: 022-795-7235, E-mail: miyamoto@aki.che.tohoku.ac.jp
問い合わせ先：ペガサスソフトウェア株式会社
〒104-0032 東京都中央区八丁堀4丁目2番2号共同ビル5階
TEL: 03-3553-7211, FAX: 03-3553-7212
問い合わせ先：株式会社菱化システム
〒104-0033 東京都中央区新川11-28-38 東京ダイヤビル3号館3階
TEL: 03-3553-9206, FAX: 03-3553-9207

その他材料の理論設計

1. 絶縁破壊特性
2. 熱電変換材料
3. 生体触媒
4. カーボン材料
5. 色材料
6. 自己組織化現象

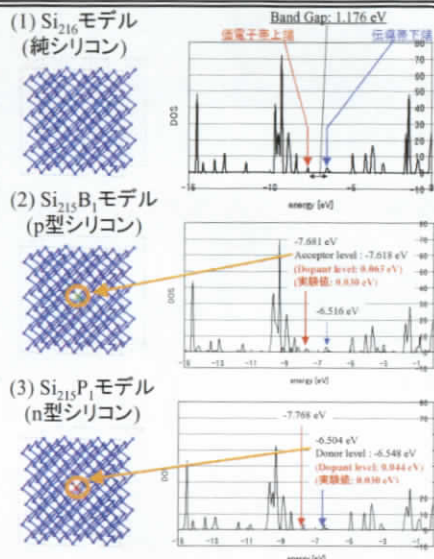
その他材料の理論設計

1. 絶縁破壊特性
2. 熱電変換材料
3. 生体触媒
4. カーボン材料
5. 色材料
6. 自己組織化現象

「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」 オリジナルに開発した高速化量子分子動力学法で広がる無限の可能性

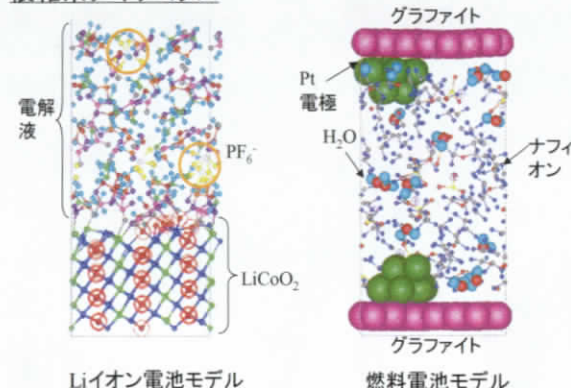
バンド構造の超精密計算(Si系)

従来は不可能であった現実的大規模モデルによる高速かつ高精度な計算が可能
バンドギャップ不純物準位が実験値と精度良く一致



トータルシステムシミュレータ

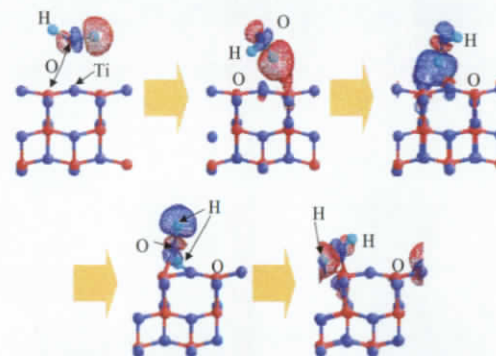
複雑系ダイナミクス



従来は不可能であった電池システム全体のような成分かつ複雑大規模系での化学反応ダイナミクスが計算可能

光励起ダイナミクスシミュレータ

アナターゼ型TiO₂触媒による水の光分解ダイナミクス

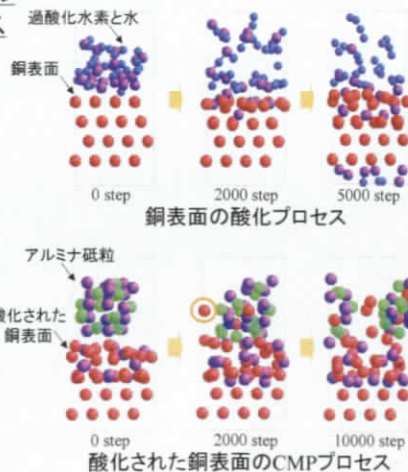


従来の第一原理分子動力学法では困難な大規模複雑系の光励起ダイナミクスの解明が可能

CMPプロセスシミュレータ

ケミカルメカニカル反応ダイナミクス

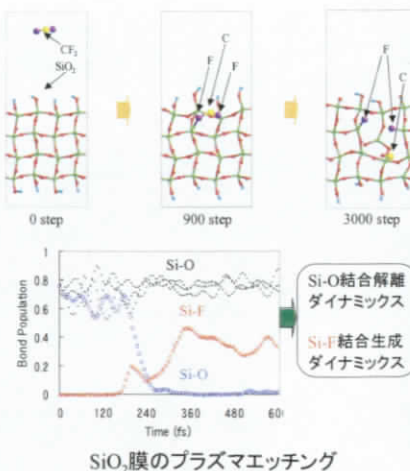
従来は不可能であったケミカルおよびメカニカルの超複雑系ダイナミクスを現実的大規模モデルにより電子状態の変化とともに追跡可能



プラズマプロセスシミュレータ

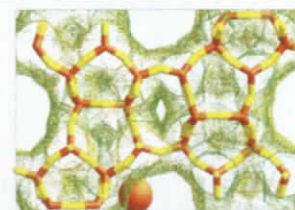
表面反応ダイナミクス

第一原理分子動力学法では困難なプラズマプロセスの化学反応ダイナミクスが計算可能



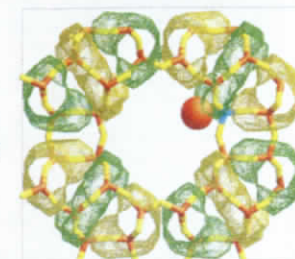
分子軌道・電子状態ダイナミクス

従来は不可能であった複雑な構造の酸化触媒表面について分子軌道ダイナミクス・電子状態ダイナミクスが高速に計算可能



Cu-ZSM5の分子軌道

開発した3次元グラフィックインターフェースNEW-RYUGAにより高速な解析が可能



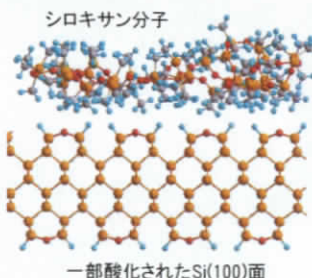
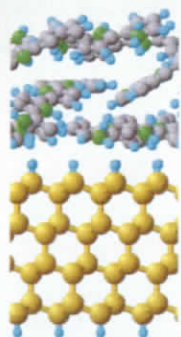
Cu-Mordeniteの分子軌道

「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」 宮本研究室で開発したオリジナル計算化学プログラムが約束する 世界的な競争力を持つ新しいモノ造り技術

モンテカルロシミュレータMONTA

Si表面への導電性
有機分子の吸着状態

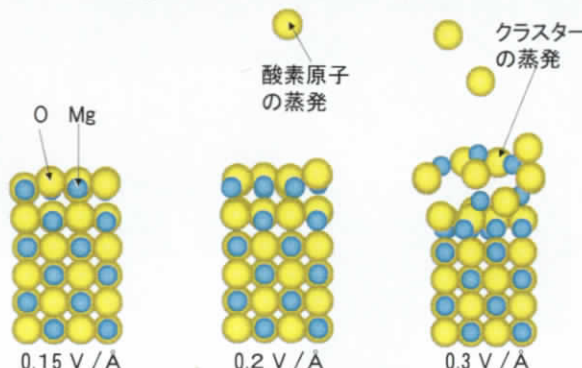
Si表面におけるケミカル
コンタミネーションの解明



従来は不可能であった大規模複雑系のモンテカルロ
シミュレーションが高速・高精度に計算可能

電場ダイナミクスシミュレータ

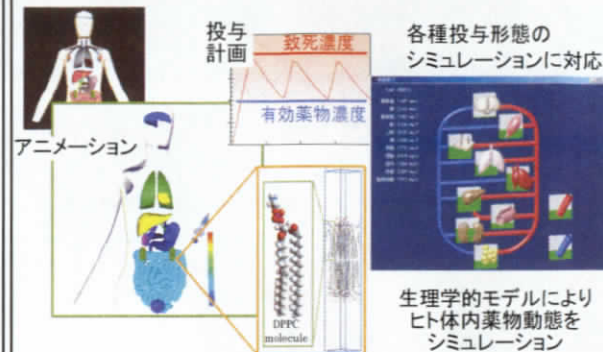
プラズマディスプレイにおける電場下での
MgO保護膜の劣化ダイナミクス



従来は不可能であった電場がかかった状態での
量子ダイナミクスの解明が可能

薬物動態シミュレータ

薬物の生体内の分布をシミュレーション
三次元モデルによる可視化



生体内の薬物動態を計算・三次元モデルを可視化
することにより、パーソナル化医療のためのマルチスケール
ヒューマンインターフェイスを実現

トライボロジーシミュレータTRIBOSIM

摩擦現象ダイナミクス



層状構造を形成

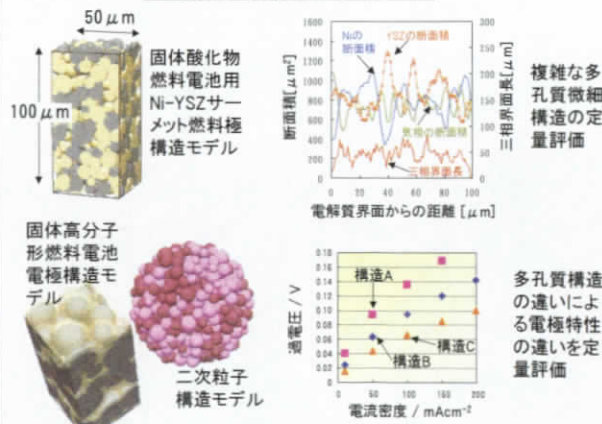


層状構造を形成せず
分子同士が絡み合う

従来は不可能であった大規模複雑系の摩擦現象
の解明が可能

実践的マルチスケールシミュレーション

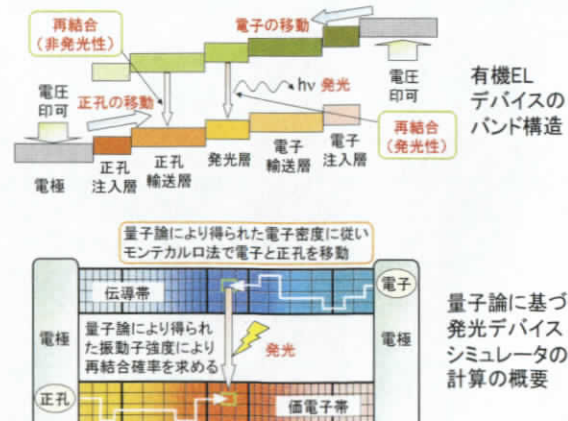
三次元多孔質シミュレータ



従来は不可能であったミクロ物性とマクロ特性をつ
なぐの実現

有機ELデバイスシミュレータ

量子論に基づく有機ELデバイスシミュレーション



従来は不可能であった量子論に基づく有機ELデバイ
スの解明が可能

コンピュータ支援分子設計・材料設計の方法

- 1 電子論: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 古典原子論: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 化学反応ダイナミックス: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 メソ・マクロモデリング: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 インフォマティックス: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 可視化: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 実験融合コンピュータ化学(本物シミュレーション)

量子化学

Hamiltonian

Energy eigenvalue

$$\underline{H} \underline{\Psi} = \underline{E} \underline{\Psi}$$

Wave Function

The diagram shows the Schrödinger equation $\underline{H} \underline{\Psi} = \underline{E} \underline{\Psi}$ in the center. The symbols \underline{H} , $\underline{\Psi}$, \underline{E} , and $\underline{\Psi}$ are rendered in a blue, double-outlined font. Four arrows point from text labels to these symbols: 'Hamiltonian' points to the first \underline{H} , 'Energy eigenvalue' points to the \underline{E} , and 'Wave Function' has two arrows pointing to both $\underline{\Psi}$ symbols.

Hatree-Fock, PostHF法 (ab-initio法)

Gaussian etc

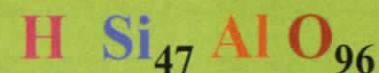
密度汎関数法 (DFT法)
(第一原理計算)

Dmol³ ADF etc

周期表の全ての元素に対する非経験的定量計算が実現

DFT構造最適化計算 (周期境界条件)

H-MOR型ゼオライト

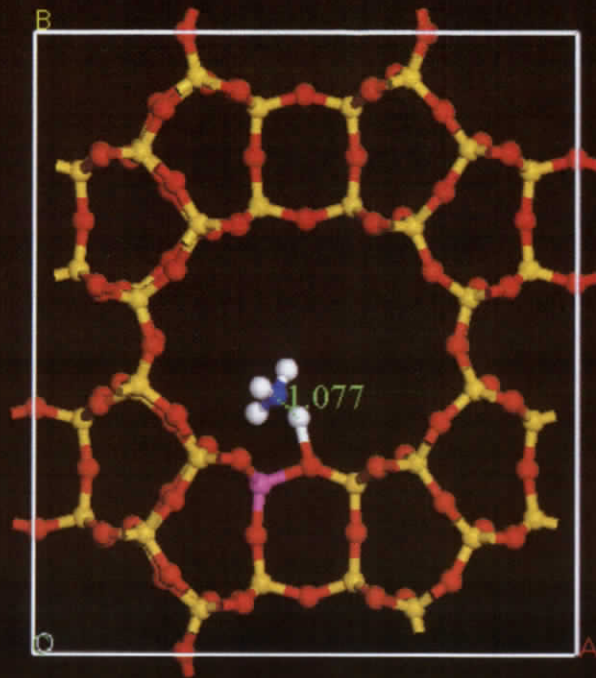


構造については、通常
0.001~0.005Å程度の
誤差で実験と一致

格子定数/ Å	a	b	c
Siliceous MOR(実験値)	18.101	20.501	7.526
HMOR*(実験値)	18.223	20.465	7.531
HMOR (計算値)	18.2665	20.368	7.5352

構造の非
経験的な
再現、予測

アンモニア吸着による 強酸性の検証



geometry for the
optimized structure

O-Hp 1.638 Å

Hp-N 1.077 Å

NH₁-O4 1.674 Å

NH₂-O4 2.618 Å

Hirshfeld charge

Si 0.56

O -0.28

N -0.049

Al 0.495

Hp 0.126

H₁ 0.123 ; H₂ 0.174 ;

H₃ 0.187

O₁₀ -0.309 ; O₄ -0.352

O₄' -0.316 ; O₂ -0.343

$$E_{ads} = E_{MOR-NH_3} - E_{MOR} - E_{NH_3}$$

$$= \underline{-147.89 \text{ kJ/mol}}$$

実験値 146-154 kJ/mol(NH₃吸着熱)

吸着エネルギーの非経験的な再現・予測

Periodic Table

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	¹ H															² He		
2	³ Li	⁴ Be									⁵ B	⁶ C	⁷ N	⁸ O	⁹ F	¹⁰ Ne		
3	¹¹ Na	¹² Mg									¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar		
4	¹⁹ K	²⁰ Ca	²¹ Sc	²² Ti	²³ V	²⁴ Cr	²⁵ Mn	²⁶ Fe	²⁷ Co	²⁸ Ni	²⁹ Cu	³⁰ Zn	³¹ Ga	³² Ge	³³ As	³⁴ Se	³⁵ Br	³⁶ Kr
5	³⁷ Rb	³⁸ Sr	³⁹ Y	⁴⁰ Zr	⁴¹ Nb	⁴² Mo	⁴³ Tc	⁴⁴ Ru	⁴⁵ Rh	⁴⁶ Pd	⁴⁷ Ag	⁴⁸ Cd	⁴⁹ In	⁵⁰ Sn	⁵¹ Sb	⁵² Te	⁵³ I	⁵⁴ Xe
6	⁵⁵ Cs	⁵⁶ Ba	⁵⁷ L	⁷² Hf	⁷³ Ta	⁷⁴ W	⁷⁵ Re	⁷⁶ Os	⁷⁷ Ir	⁷⁸ Pt	⁷⁹ Au	⁸⁰ Hg	⁸¹ Tl	⁸² Pb	⁸³ Bi	⁸⁴ Po	⁸⁵ At	⁸⁶ Rn
7	⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra	⁸⁹ A															
			⁵⁷ L	⁵⁸ La	⁵⁹ Ce	⁶⁰ Pr	⁶¹ Nd	⁶² Pm	⁶³ Sm	⁶⁴ Eu	⁶⁵ Gd	⁶⁶ Tb	⁶⁷ Dy	⁶⁸ Ho	⁶⁹ Er	⁷⁰ Tm	⁷¹ Yb	⁷² Lu
			⁸⁹ A	⁹⁰ Ac	⁹¹ Th	⁹² Pa	⁹³ U	⁹⁴ Np	⁹⁵ Pu	⁹⁶ Am	⁹⁷ Cm	⁹⁸ Bk	⁹⁹ Cf	¹⁰⁰ Es	¹⁰¹ Fm	¹⁰² Md	¹⁰³ No	¹⁰⁴ Lr

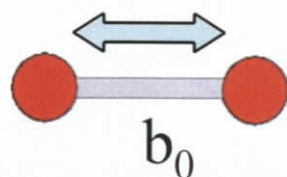
- 典型金属元素
- 半金属元素
- 非金属元素
- 遷移金属元素
- 希ガス

量子論計算精度の向上→ 信頼できる原子間ポテンシャルの非経 験的な決定

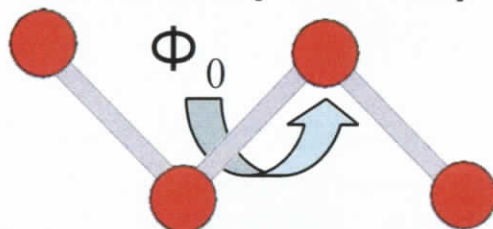
$$E = \sum_b D_b [1 - e^{-\alpha(b-b_0)}]^2 + \sum_{\theta} H_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\phi} H_{\phi} [1 + \cos(n\phi - \phi)] + \sum_i \sum_{j>i} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \right]$$

Morse項
Angle項
Torsion項
L-J項
Coulomb項

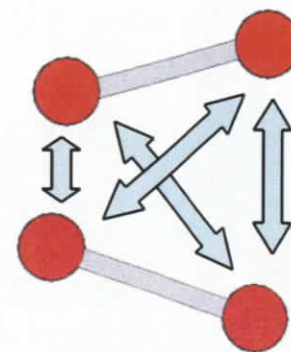
Morse(結合長)



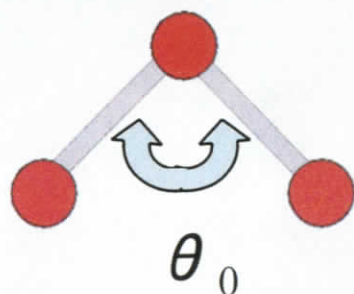
Torsion(二面角)



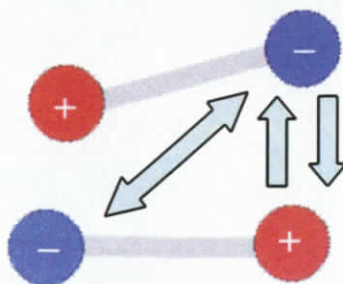
**Lennard-Jones
(ファンデルワールス力)**



Angle(結合角)



Coulomb(静電)

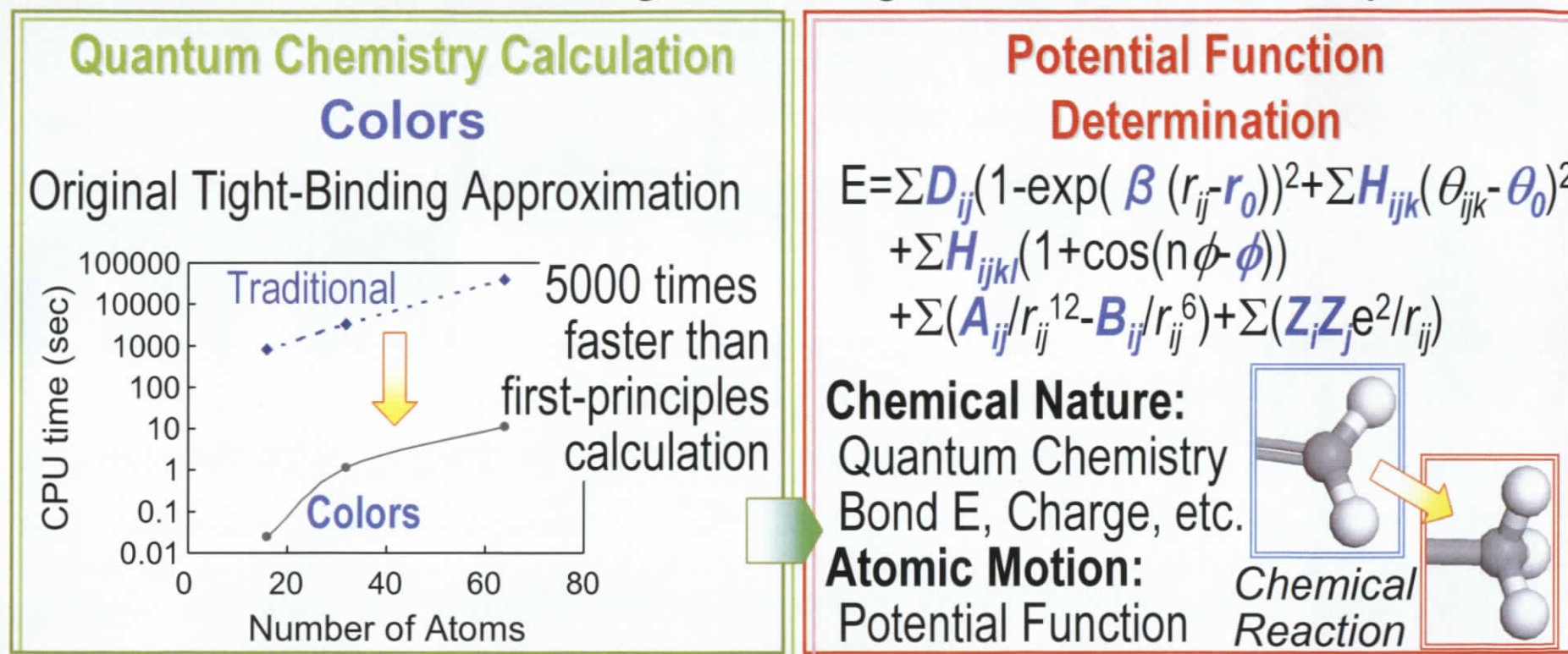


実践的計算化学のための新手法・新ソフト開発

- 1 電子論: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 古典原子論: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 化学反応ダイナミックス: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 メソ・マクロモデリング: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 インフォマティックス: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 可視化: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 実験融合コンピュータ化学(本物シミュレーション)

Ultra Accelerated QCMD Method: 優れた要素手法の開発

New Scheme based on Tight-Binding Quantum Chemistry Method



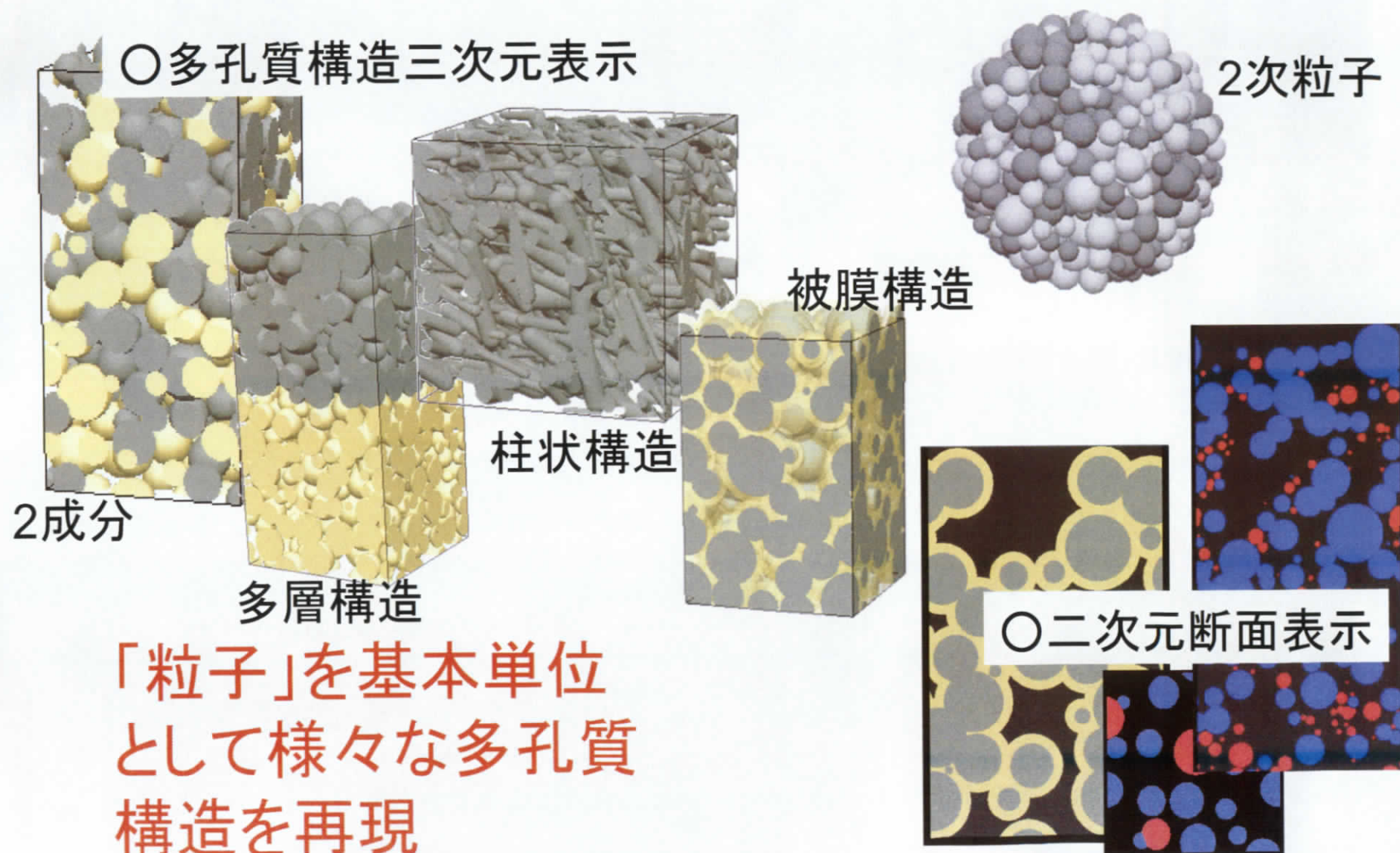
Time Evolution (Quantum Chemistry-based Molecular Dynamics)

10,000,000 Times Acceleration Compared with First-Principles MD

コンピュータ支援分子設計・材料設計の方法

- 1 電子論: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 古典原子論: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 化学反応ダイナミクス: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 メソ・マクロモデリング: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 インフォマティックス: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 可視化: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 実験融合コンピュータ化学(本物シミュレーション)

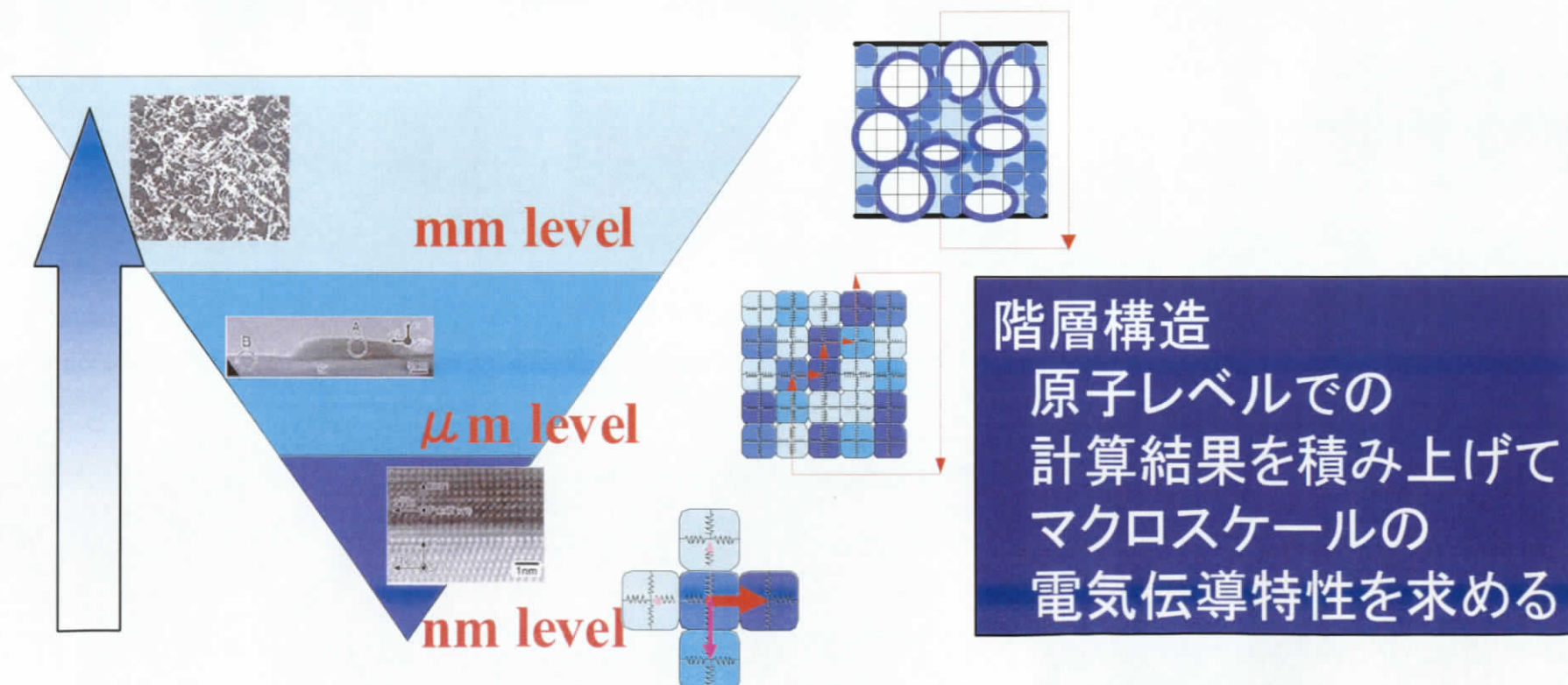
三次元多孔質構造シミュレータPOCO²



$\mu\text{m}\cdot\text{mm}$ スケールの電気伝導シミュレーション

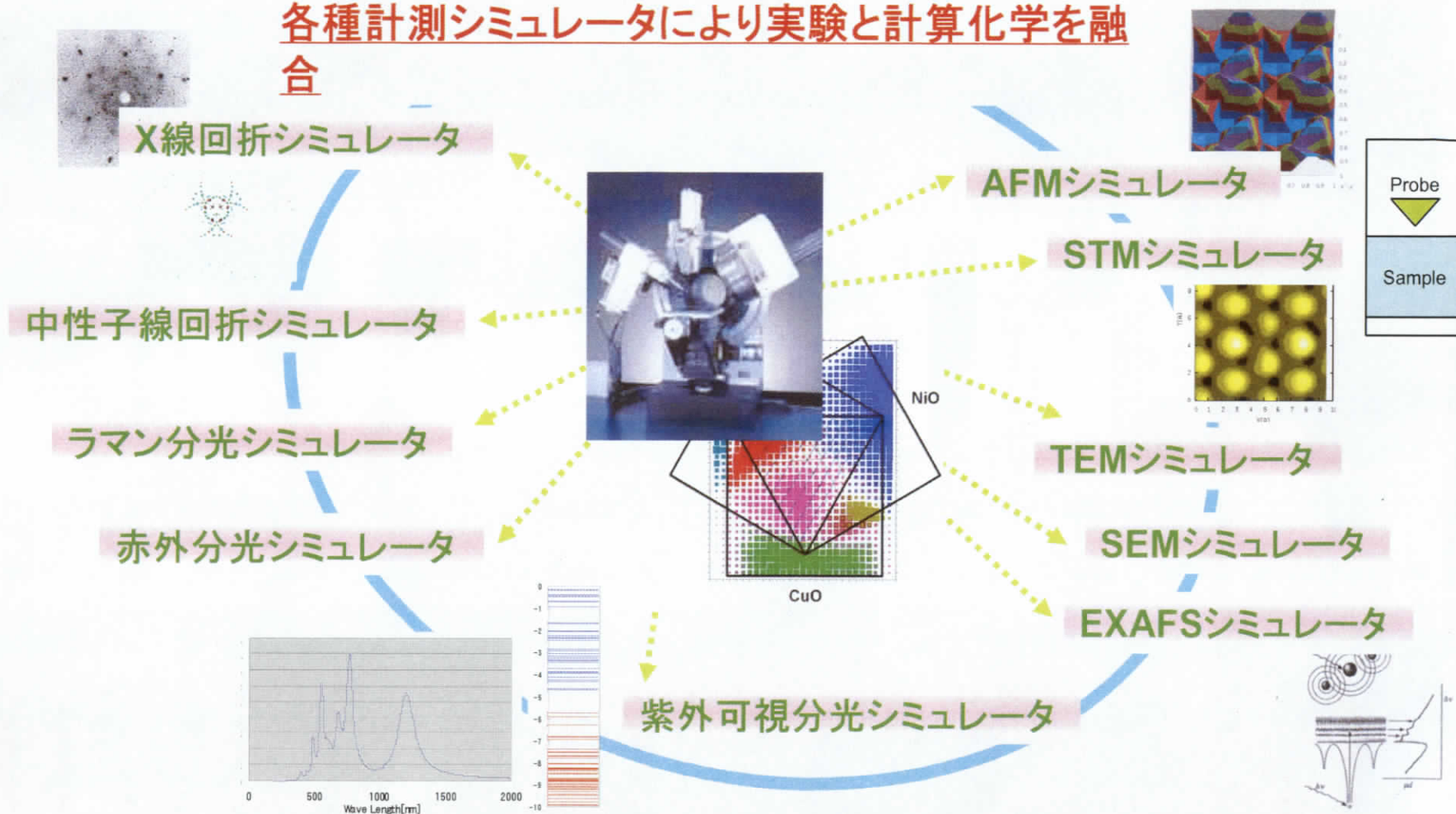
計算方法

- ・各セルの電気伝導特性を数値化してブロック化⇒多層構造



実験融合構造解析シミュレーション

各種計測シミュレータにより実験と計算化学を融合



「本物」の原子・分子構造を描き出す。本物シミュレーションの実現

コンピュータが創る新しい化学

1 実践的マルチレベル計算化学の方法論

2 産業技術(自動車技術)への応用

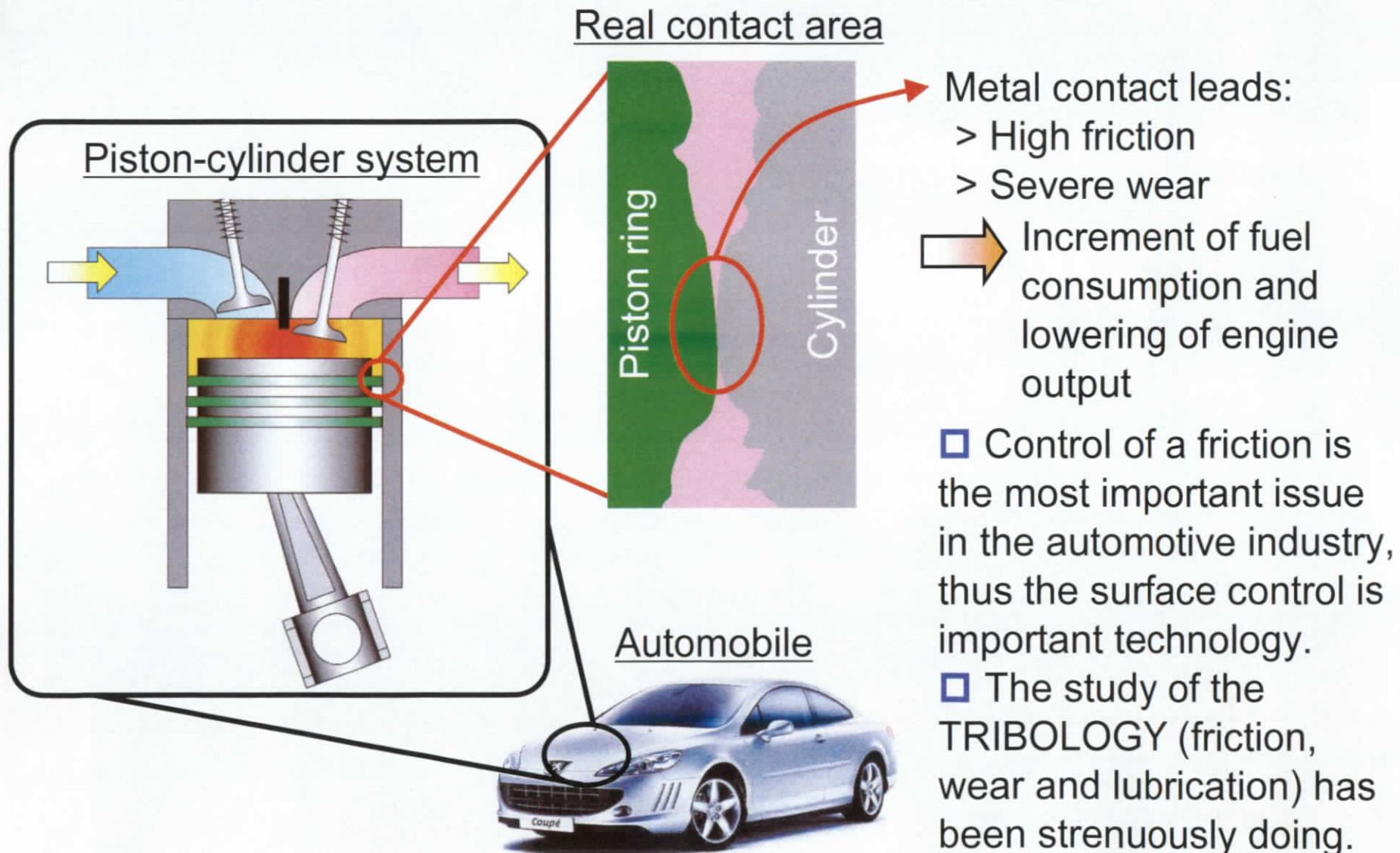
2.1 トライボロジー技術

2.2 触媒技術

2.3 蓄電池技術

3 Concluding Remarks

Tribology in the Automotive Industry



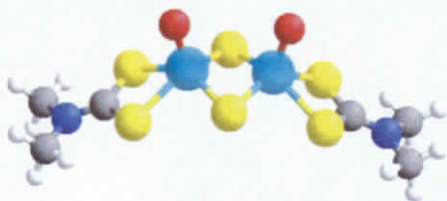
摩擦磨耗を低減するエンジンオイル添加剤開発支援 1

Application of MoS₂ tribofilm

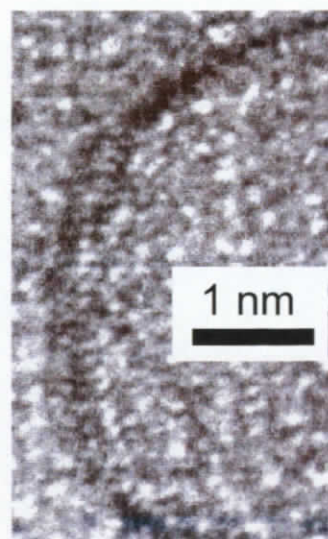
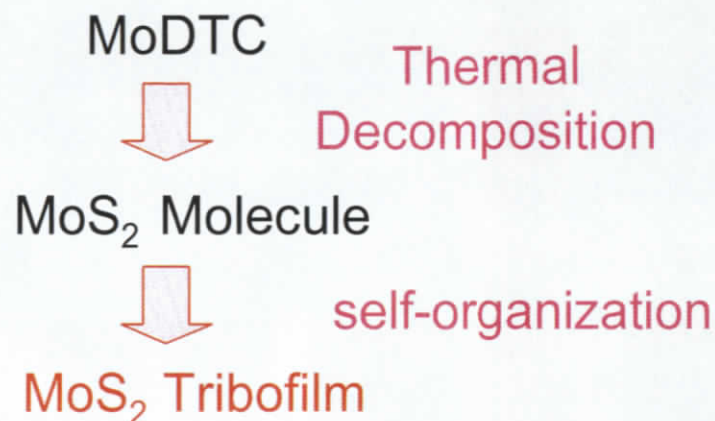
- Coating material on bearing.
- Solid lubricant applied to the space lubricant.
- Boundary lubricating film made by tribochemical reaction from the MoDTC additives.

Molybdic dialkyldithiocarbamic acid (MoDTC)

- MoDTC is friction modifier used as lubricant additive for engine oils.



Formation of MoS₂ tribofilm



The mechanism of friction reduction is attributed by the formation of MoS₂ tribofilm, as a result of the tribochemical reaction.

* TEM image

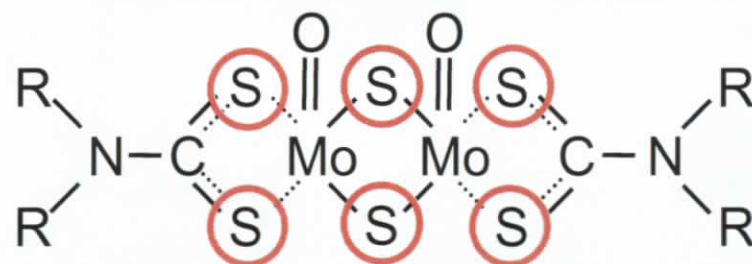
* C. Grossiord, J.-M. Martin, *Tribology International* **31**, 737–743 (1998).

超低摩擦 MoS_2 膜生成機構の解明

2

The problem of MoDTC additives for environment

- Sulfur contained in MoDTC additives is harmful to the environment catalyst for automobile.

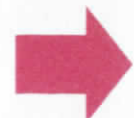


➡ Alternative friction modifier additives of MoDTC is needed

Formation mechanism of MoS_2 tribofilm

- The mechanism of MoS_2 tribofilm formation and its effect on the frictional property have not been well-clarified.

➡ To develop alternative additives, it is important to understand the formation mechanism of MoS_2 tribofilm at the atomistic and electronic levels.



We applied the New-Ryudo-CR program to the study of the tribochemical reaction during the formation of MoS_2 tribofilm, and analyzed its effect to the frictional property.

We developed a novel MD program that can deal with chemical reactions.

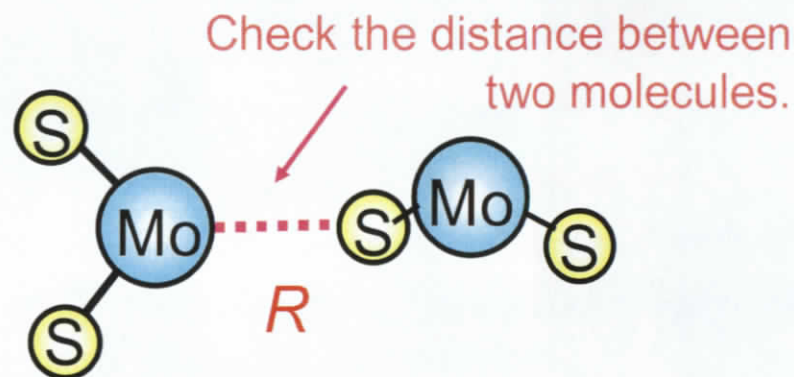
General MD program

- It is effective to analyze the frictional properties of the system.
- MD simulations can't treat chemical reaction.

New- Ryudo-CR program

- In the NEW-RYUDO-CR program, chemical reaction is stochastically considered.
- We can simulate the chemical reaction dynamics in large system.

Mechanism of judgment of chemical reaction



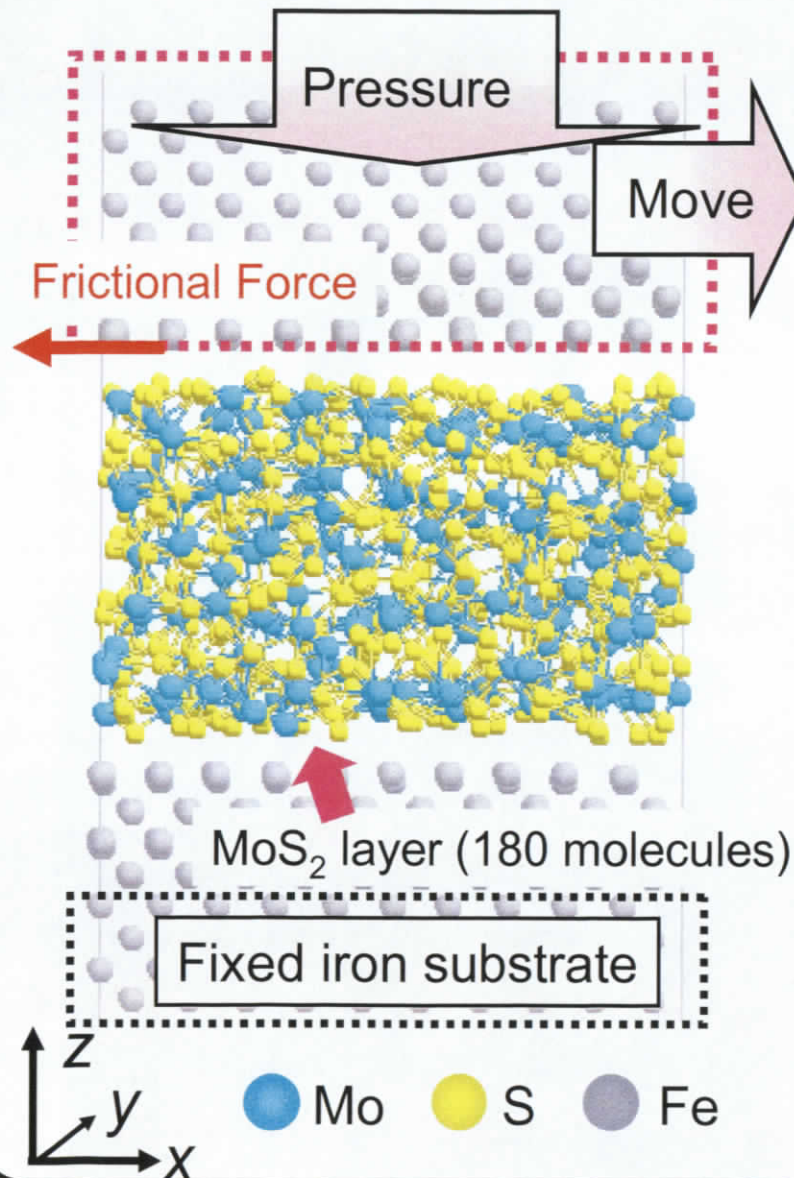
$$N \leq P_0 \frac{R_{\max} - R}{R_{\max}}$$

P_0 : Standard probability
 R_{\max} : Maximum distance for chemical reaction
 R : Interatomic distance

When a reaction is judged to occur by this equation, potential functions are automatically switched.

When bond formation between Mo and S occur, the appropriate parameters for Mo-S-Mo and S-Mo-S bonds which represent the MoS₂ crystal are introduced.

Calculation Model



Simulation condition

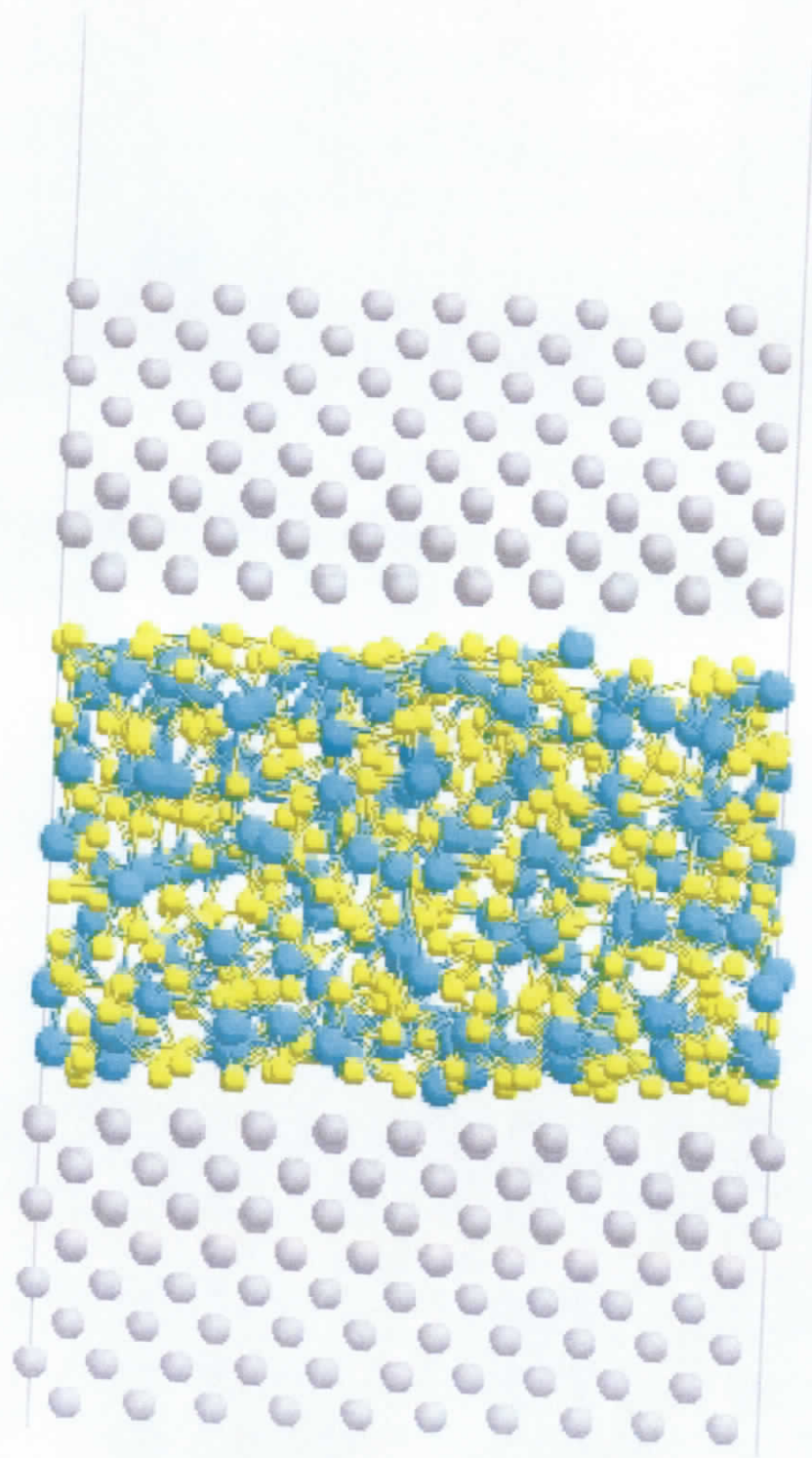
- Substrate : iron
- Step : 5,000,000step
- Integration time : 0.5 fs
- Temperature : 300 K
- Pressure : 0.5 GPa
- Moving speed : 100 m/s

Estimation of friction coefficient

Frictional force was estimated by NEW-RYUDO-CR program.

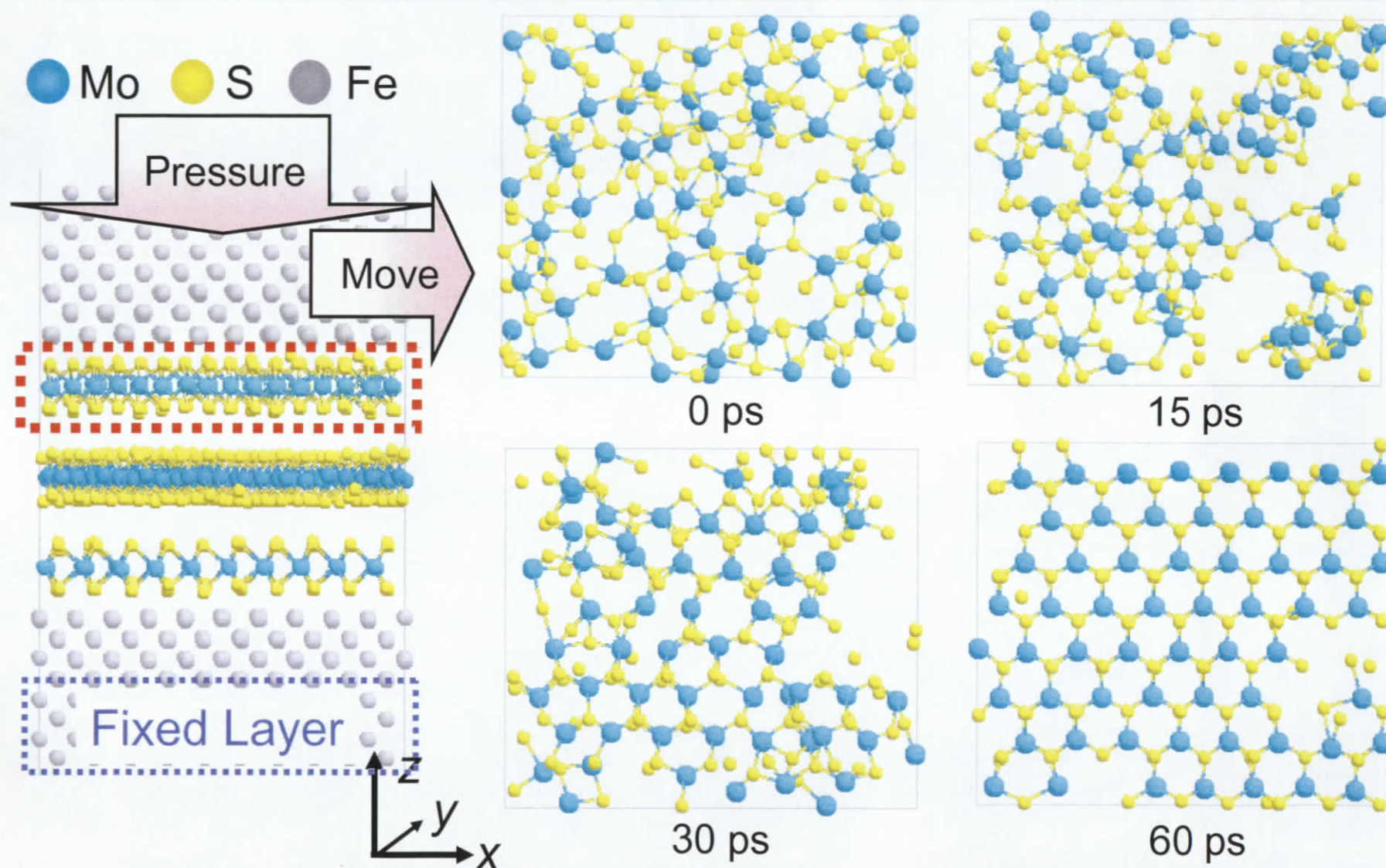
Perpendicular Load = pressure × area

$$\mu = \frac{F}{W} = \frac{\text{Frictional Force}}{\text{Perpendicular Load}}$$



Formation Dynamics of MoS_2 Tribofilm

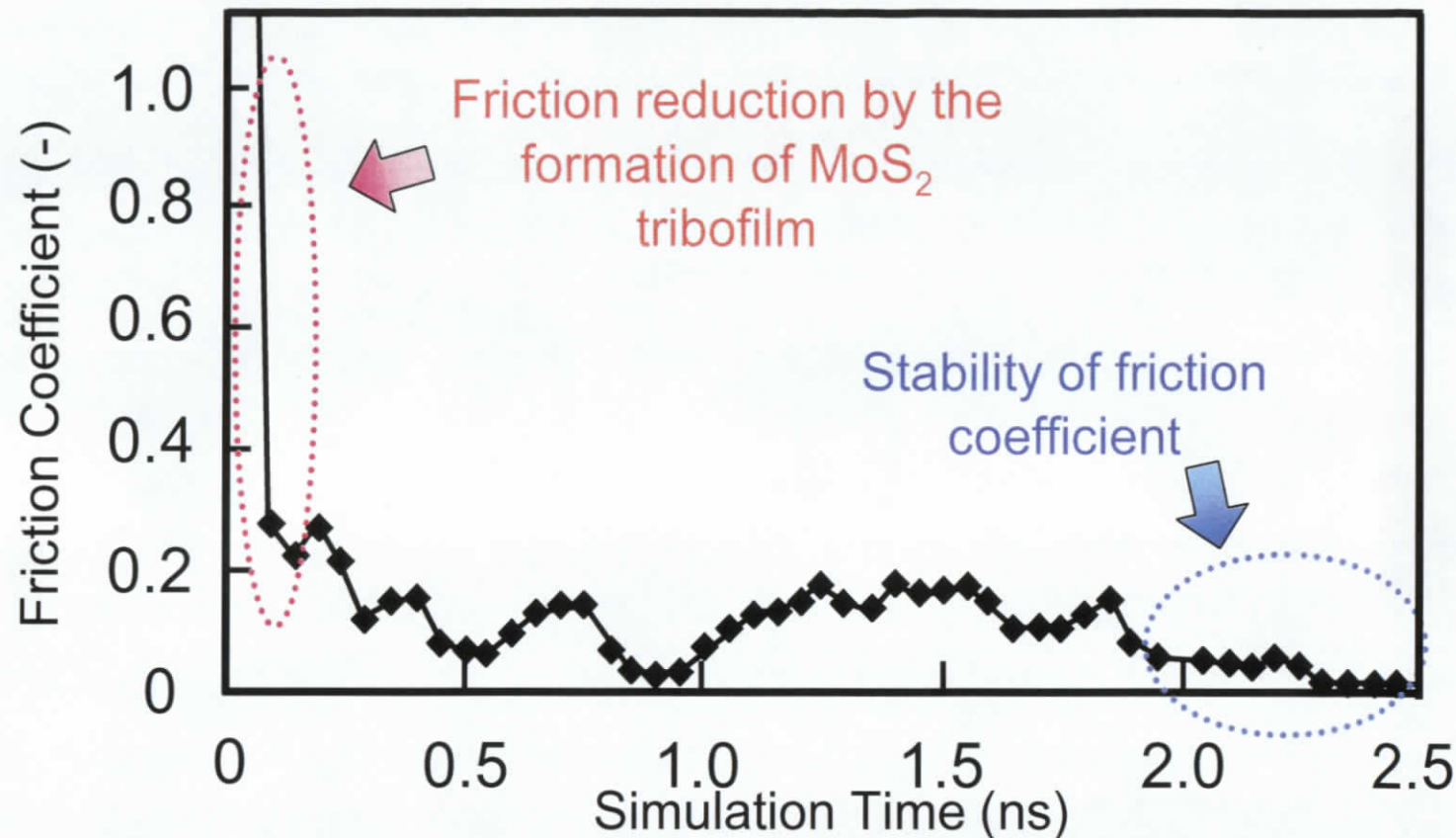
6



Hexagonal crystal structure was gradually formed by the tribochemical reaction between MoS_2 molecules.

Friction Coefficient Against Time

8



- During the first 0.1 ns, the friction coefficient significantly decreased as the layered structure of MoS₂ is formed.
➡ This result suggests the importance of the formation of MoS₂ tribofilm to achieve better lubrication properties.
- Finally, the friction coefficient became stable after 2.3 ns, and the friction coefficient was 0.006 during 2.3ns to 2.5ns.

コンピュータ化学で見る超低摩擦状態

7

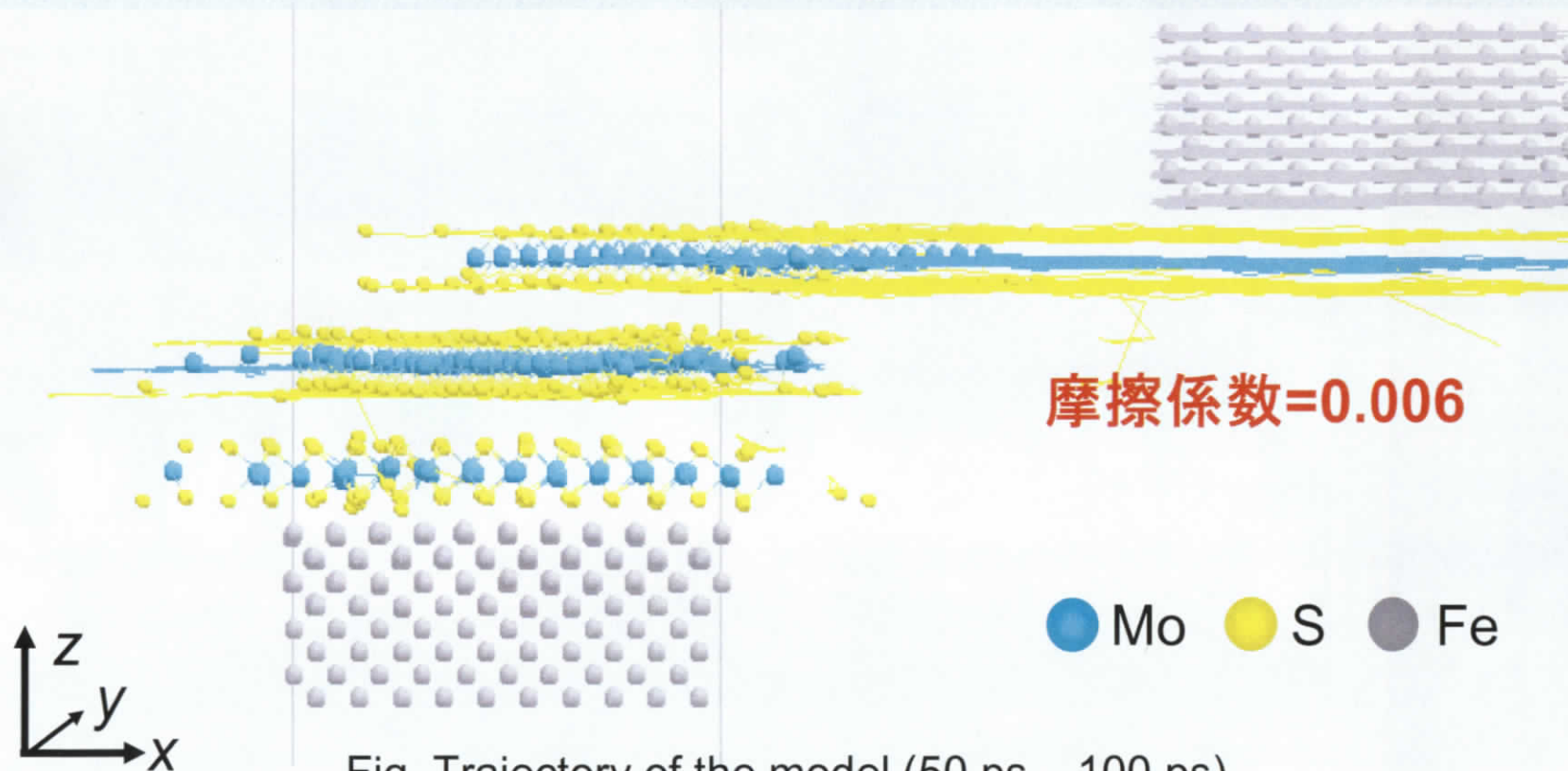


Fig. Trajectory of the model (50 ps – 100 ps)
(periodic boundary condition was not applied)

- After forming MoS₂ tribofilms, the upper MoS₂ tribofilm moved together with the sliding surface of the Fe substrate.
- The bottom MoS₂ tribofilm adhered to bottom Fe surface and scarcely moved.

Sliding was observed between sulfur layers of the upper and intermediate MoS₂ tribofilms.

コンピュータが創る新しい化学

1 実践的マルチレベル計算化学の方法論

2 産業技術(自動車技術)への応用

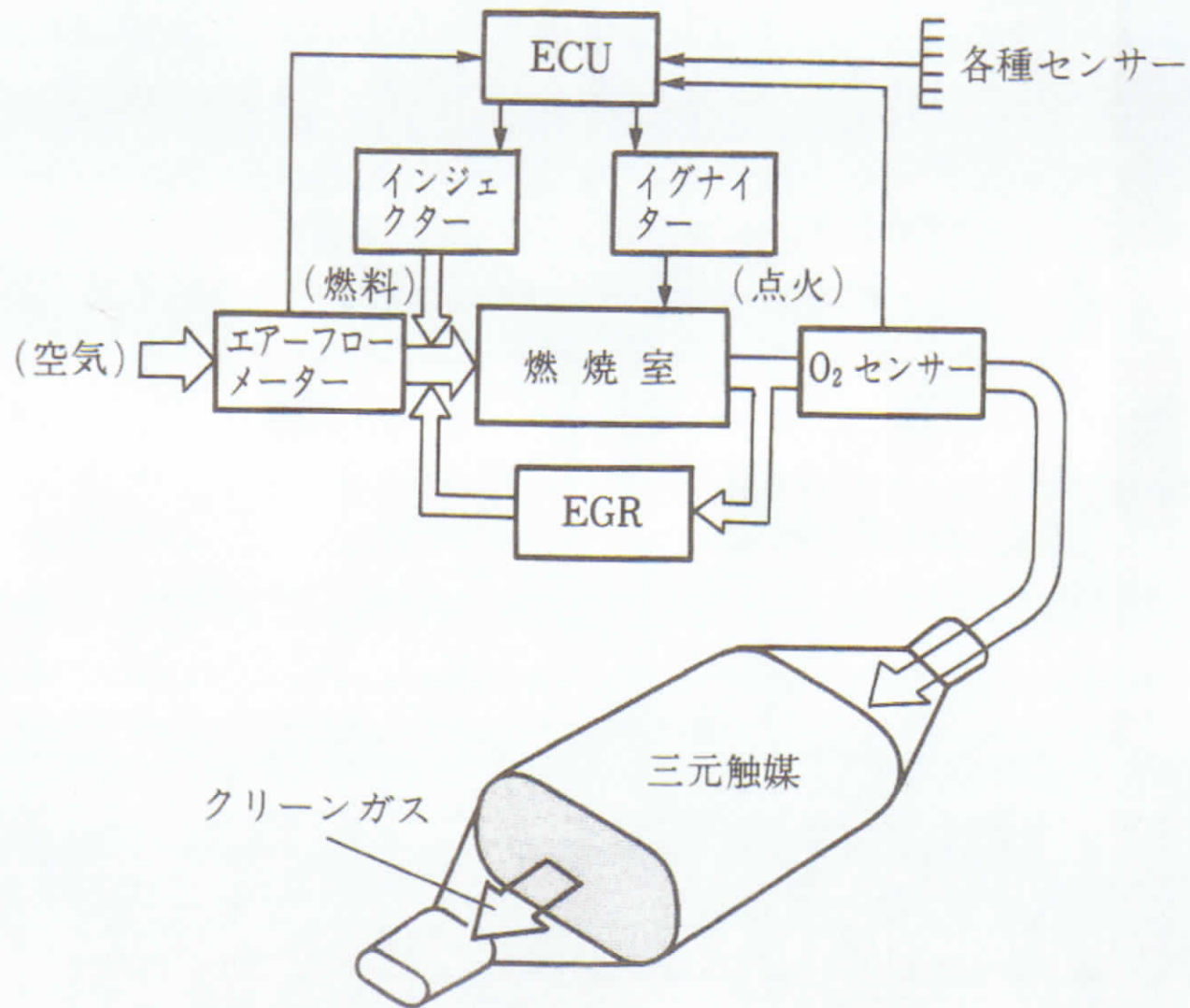
2.1 トライボロジー技術

2.2 触媒技術

2.3 蓄電池技術

3 Concluding Remarks

三元触媒システム



トヨタ自動車の世界に先駆けて実用化（1977年）

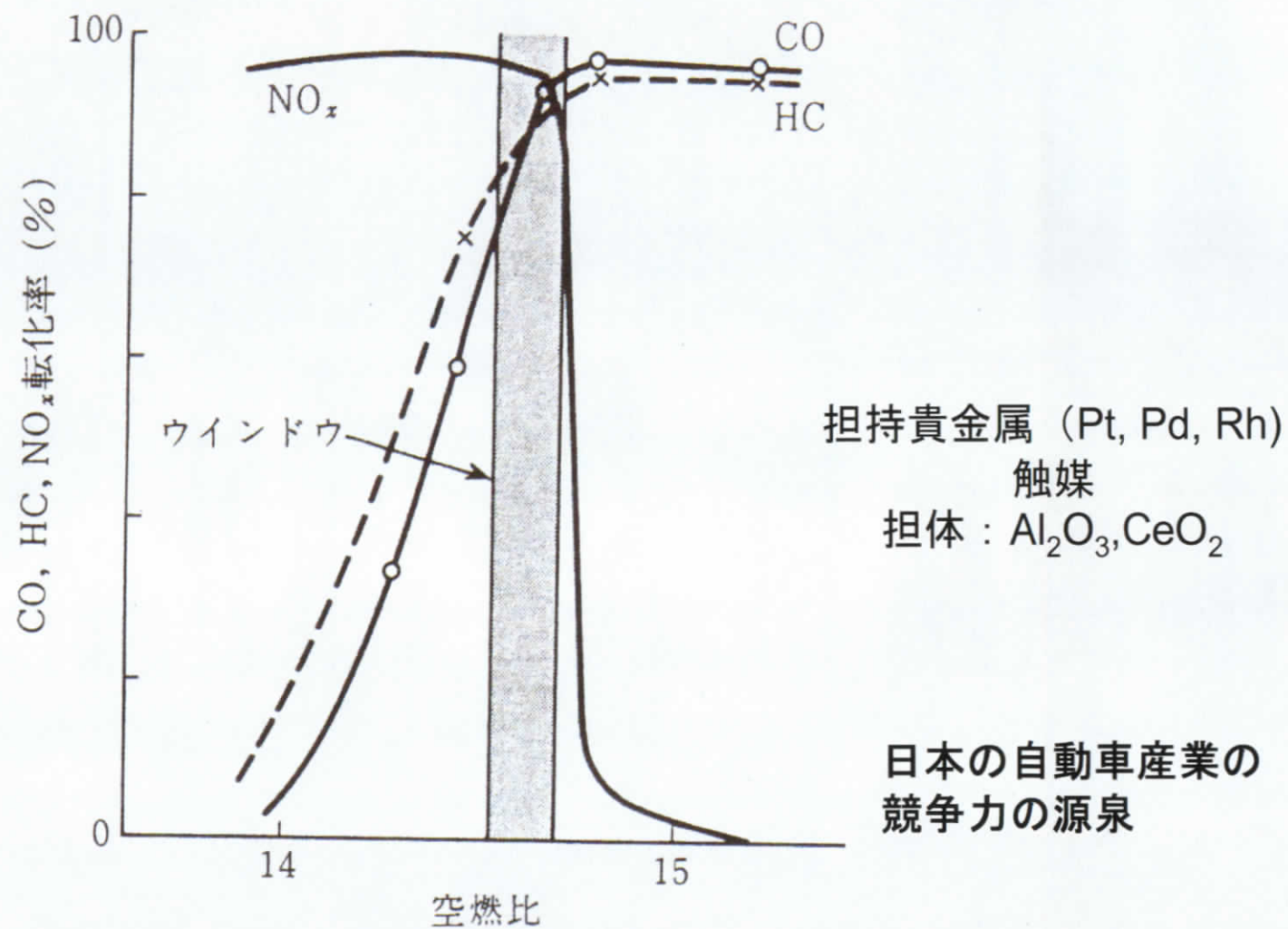
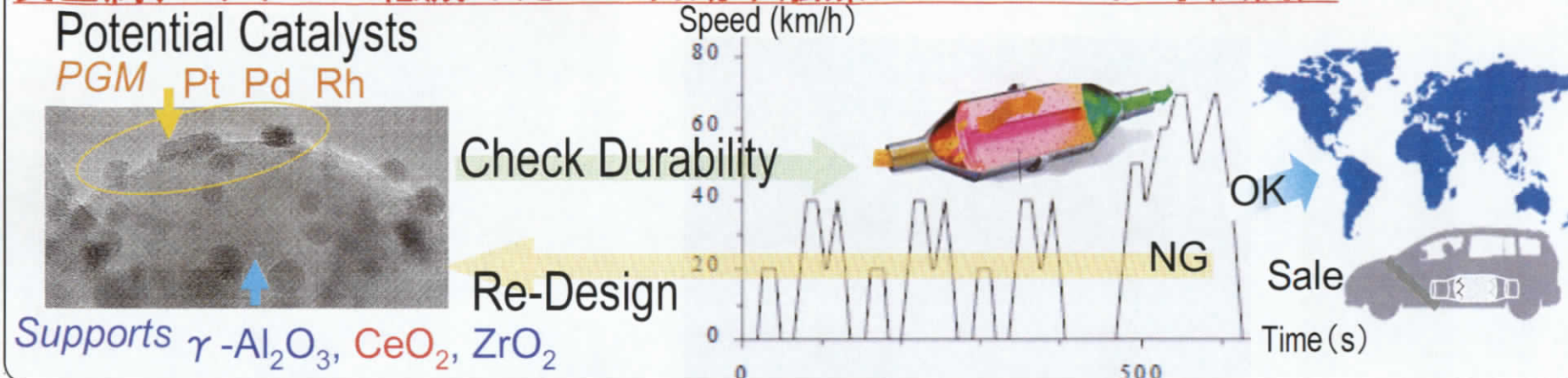


図 三元触媒の特性

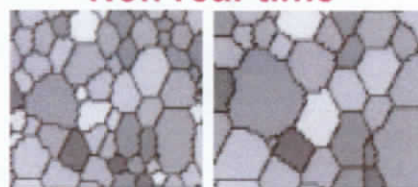
空燃比 (A/F) を 14.6 ± 0.2 にした時に NO_x, CO および HC をほとんど除去できる。アミの部分ウィンドウとよぶ。

貴金属、レアアース低減のための自動車触媒シミュレーション手法開発



Theoretical Works Background

Static Monte-Carlo Non real-time



50 MCS

100 MCS

Acta materialia 47-3, 1007, 1999

Molecular Dynamics

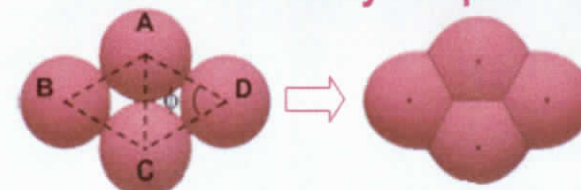
Too short "ps" for aging simulation



Computational Materials Science 14, 125, 1999

Surface Evolving Dynamics

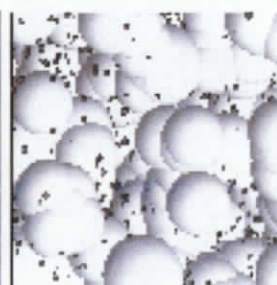
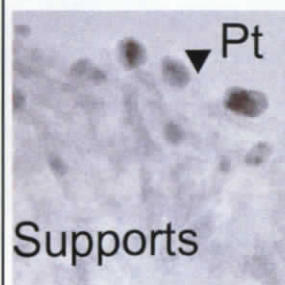
Unrealistically-simple



Acta Materialia 55, 4553, 2007

Aim

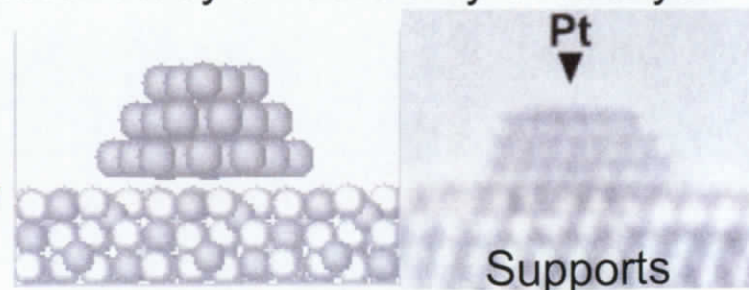
Multi-scale Simulation is applied for theoretical study on durability of catalyst.



Macro \longleftrightarrow Micro

Sintering Behavior

Diffusivity



Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

Kinetic Monte-Carlo

自動車触媒の劣化予測シミュレータ開発

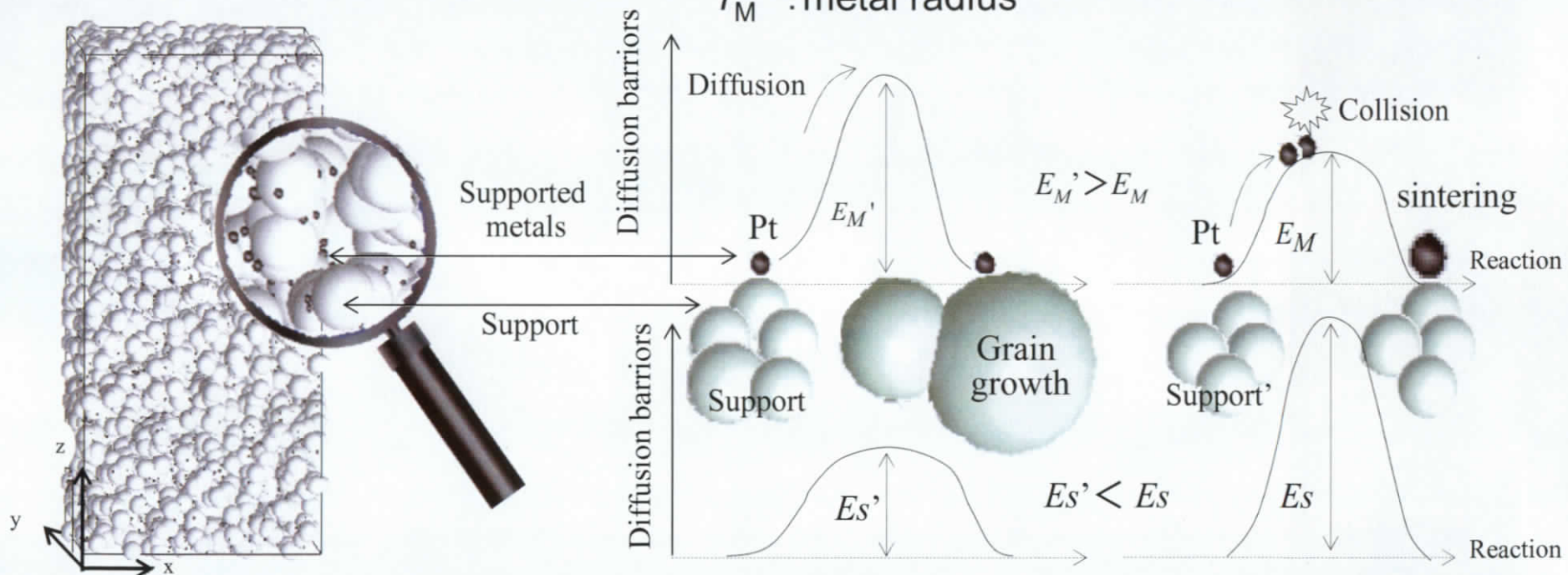
Diffusion of Supported Metals: Pt, Pd, Rh

$$D_M(r) = D_{M0} (2r_M)^{-n} \exp\left(-\frac{E_M}{RT}\right)$$

D_{M0} : Diffusion coefficient of supported metals

E_M : Activation energy for sintering of metals

r_M : metal radius



Diffusion of Supports: Al_2O_3 , ZrO_2 , CeO_2

$$D_S(r) = D_{S0} (2r_S)^{-n} \exp\left(-\frac{E_S}{RT}\right)$$

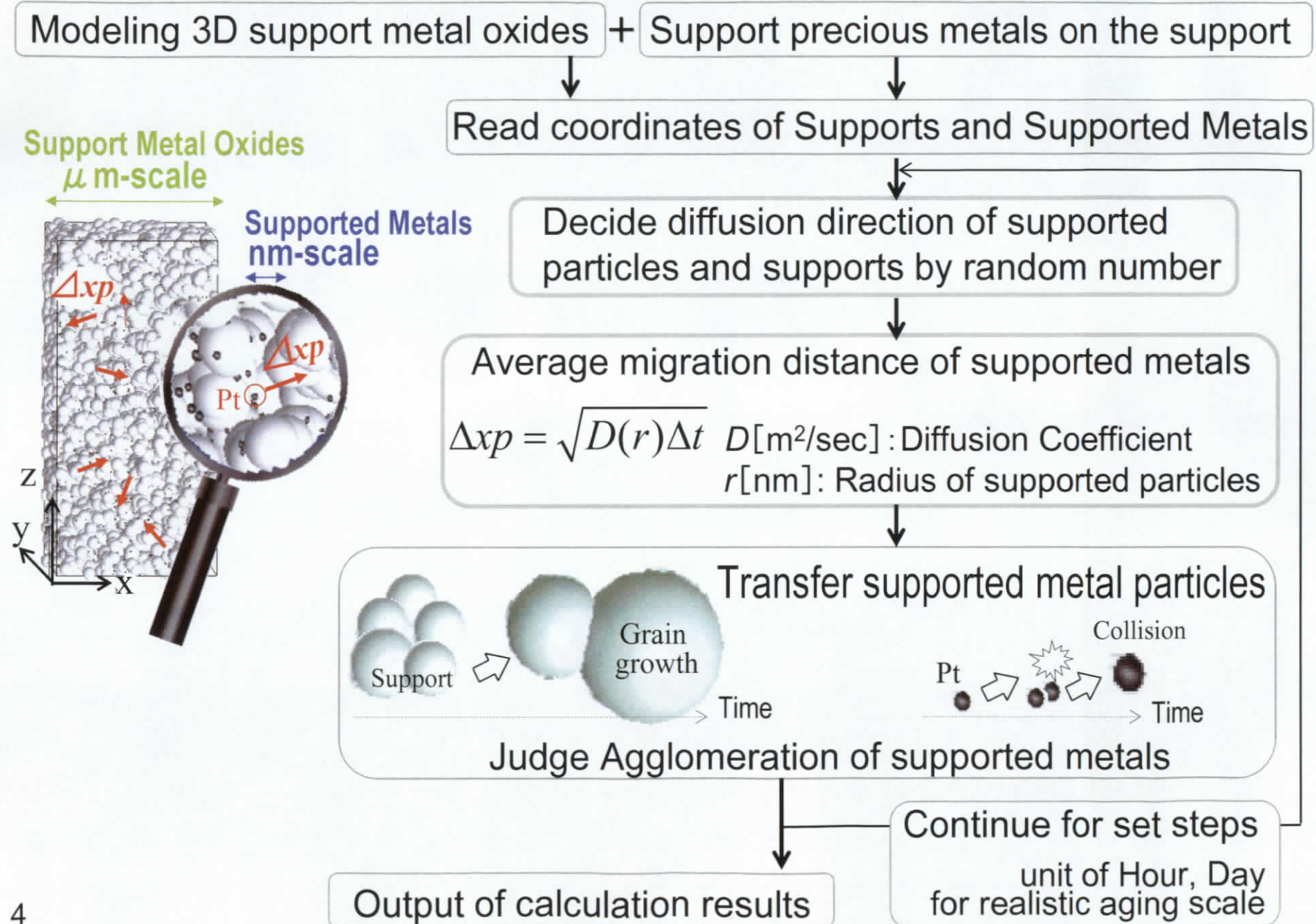
D_{S0} : Diffusion coefficient of supports

E_S : Activation energy for grain growth of supports

r_S : support radius

n : Grain-size exponent R : Universal gas constant T : Absolute temperature

Algorithm of 3D-Sintering Simulator; *SINTA*



Model & Condition for Macro-Scale Sintering Simulation

Model cell size $x=0.1 \mu\text{m}$, $y=0.2 \mu\text{m}$, $z=0.2 \mu\text{m}$ Supported Pt amount: 2wt%

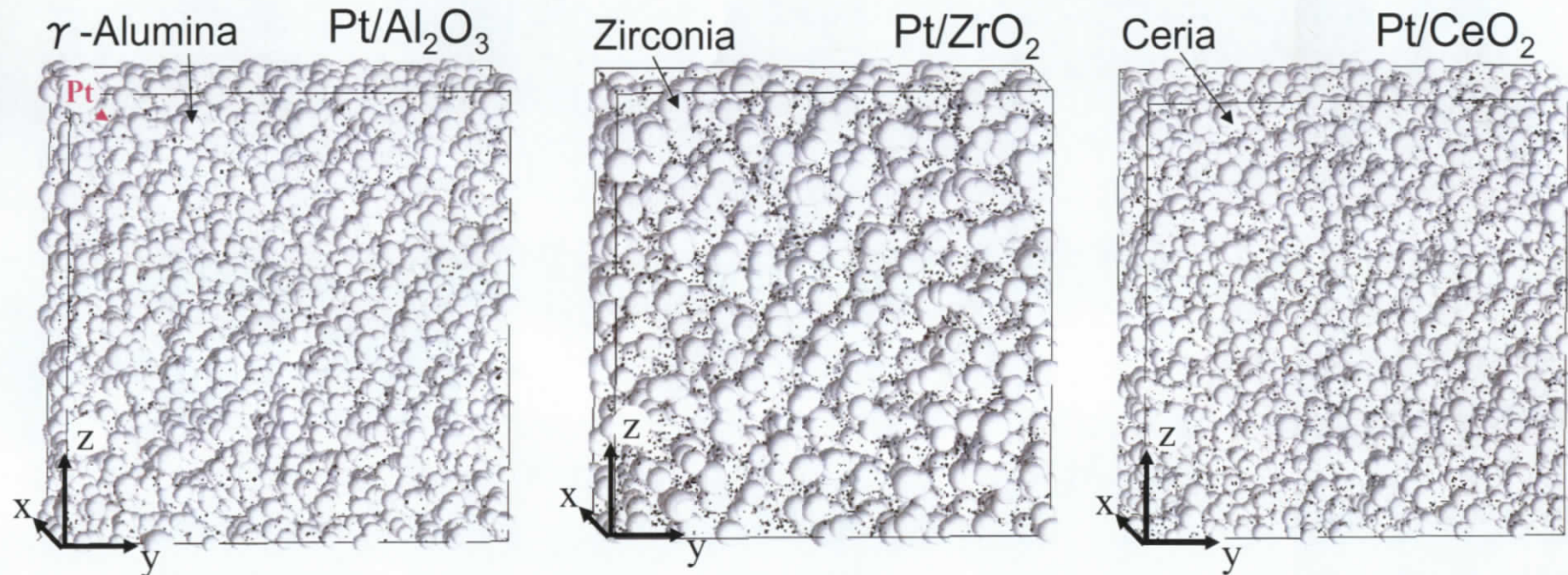


Table. Parameter for sintering simulation at 800.0 °C, 5 hours with $\Delta t=0.01$ s/step

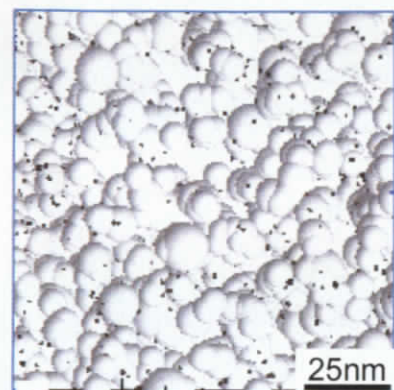
$D_S(r) = D_{S0}(2r_S)^{-n} \exp(-E_S/(RT))$							
	[m ² /s]		[kJmol ⁻¹]			[m ² /s]	
D_{s0}	7.0E4		E_S	567	$D_{s0_tetragonal}$	2.9E4	
					E_S	506	
			$D_{s0_monoclinic}$	1.0E4	E_S	360	
$D_M(r) = D_{M0}(2r_M)^{-n} \exp(-E_M/(RT))$							
D_{M0}	1.0E-16		E_M	108	D_{M0}	1.8E-10	
					E_M	113	
			D_{M0}	1.0E-20	E_M	124	

Pt/ γ -Al₂O₃ Sintering Behavior

Experimentally estimated by CO pulse method

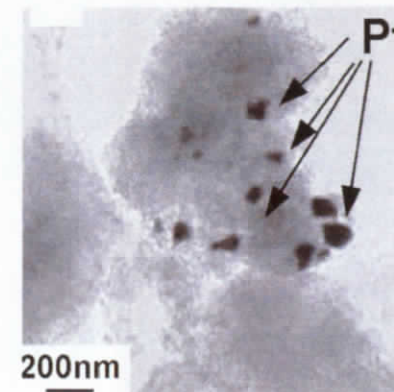
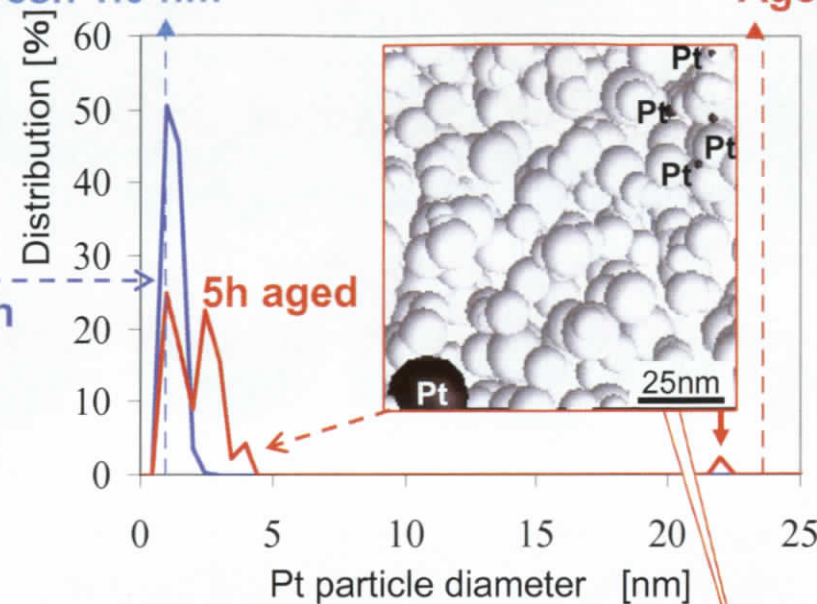
Fresh 1.0 nm

Aged 23.6 nm



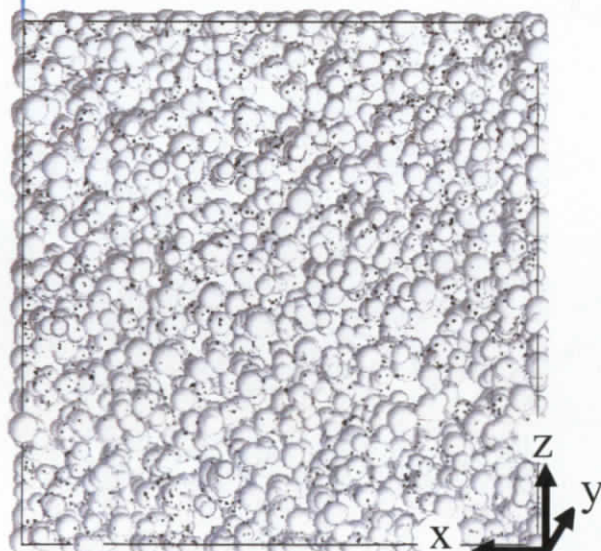
Pt γ -Alumina

Fresh

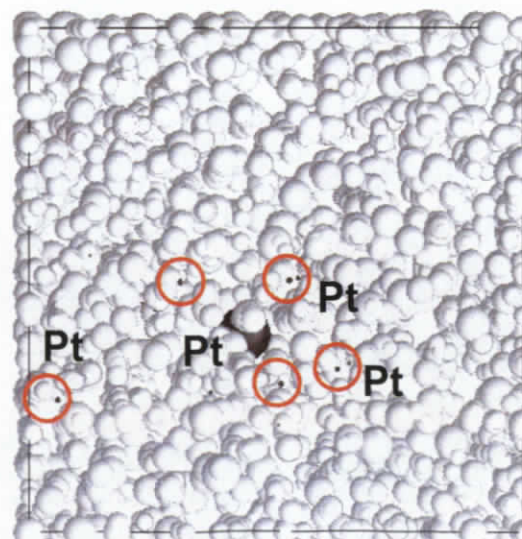


Journal of Catalysis
242 (2006) 103–109

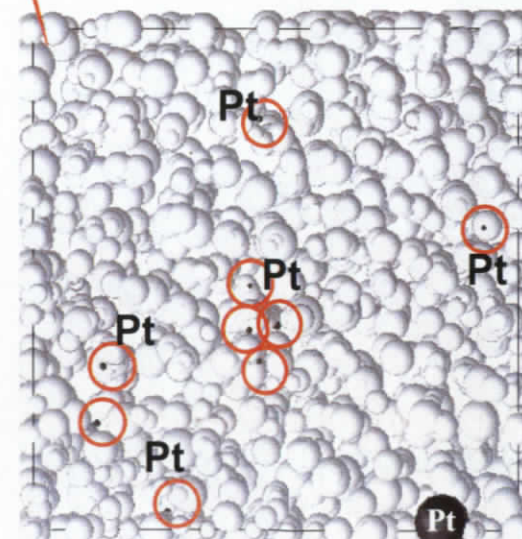
TEM images of Pt/ γ alumina
after air aging at 1073K



Fresh



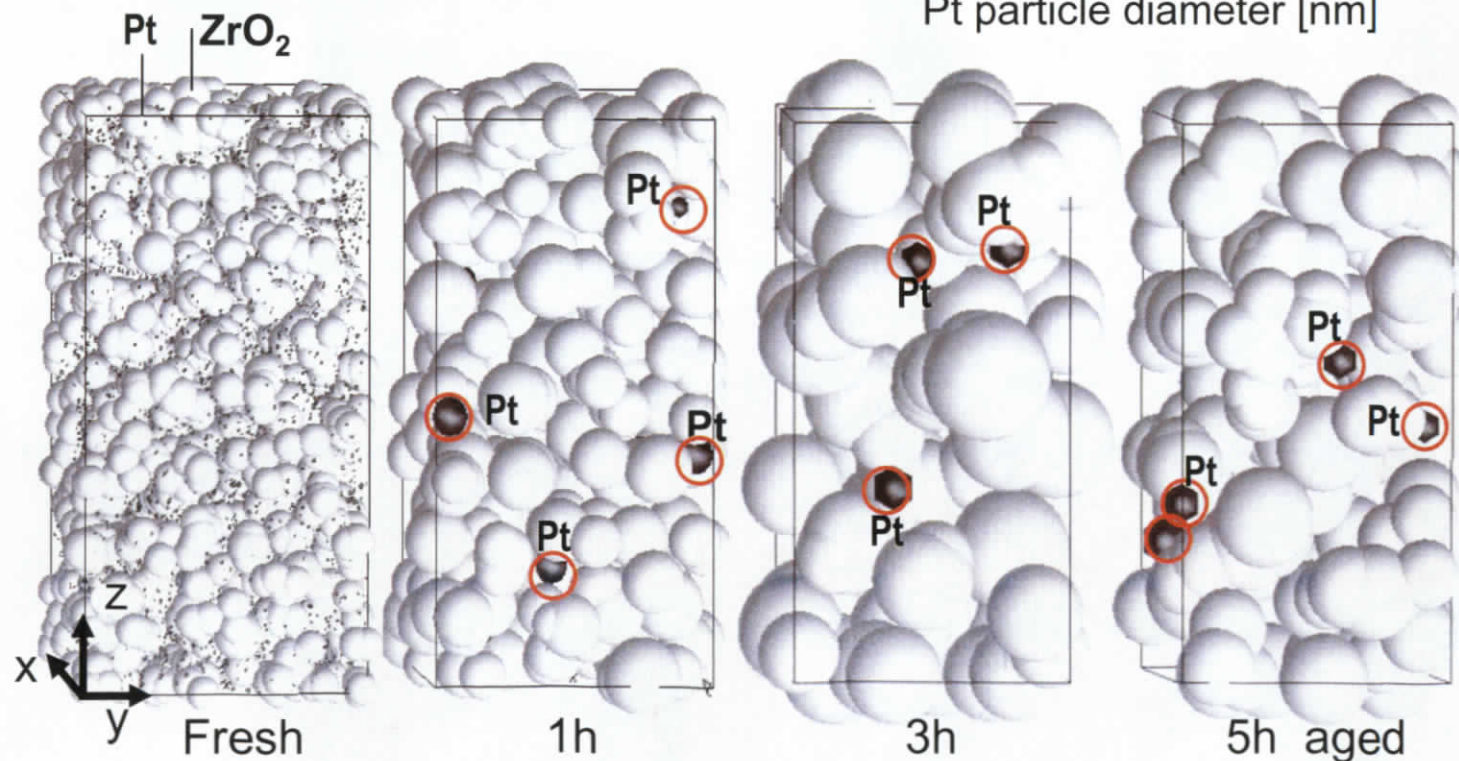
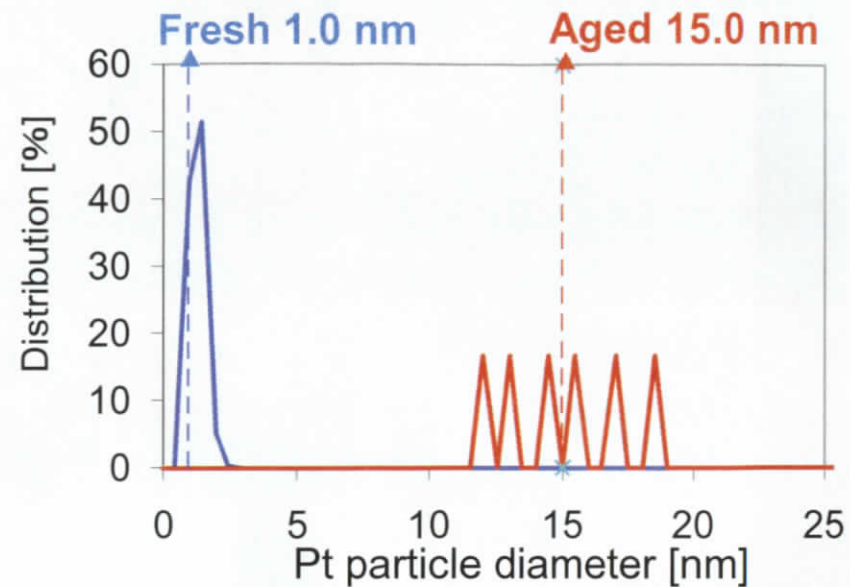
3 h



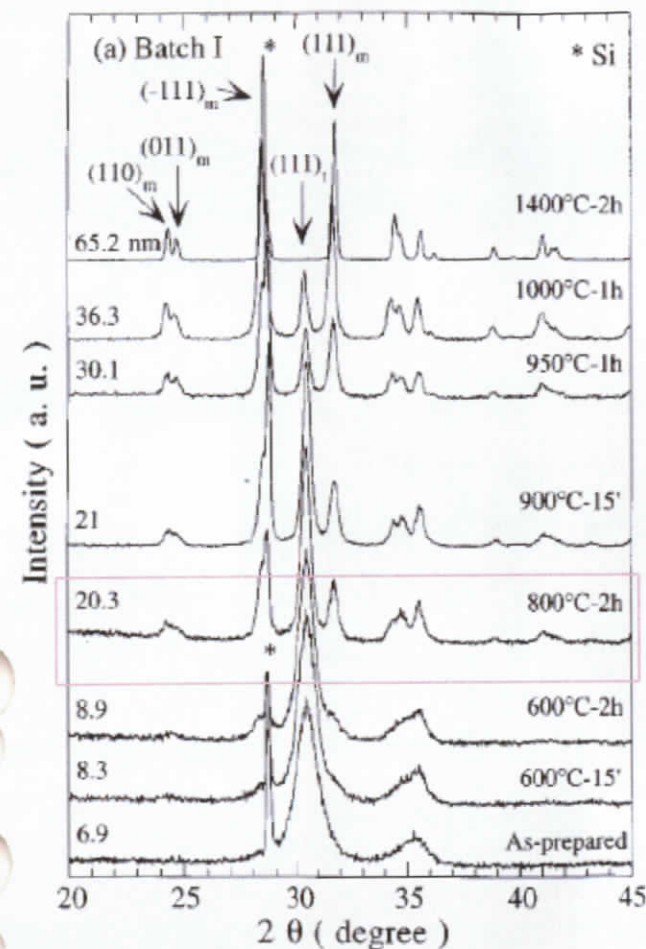
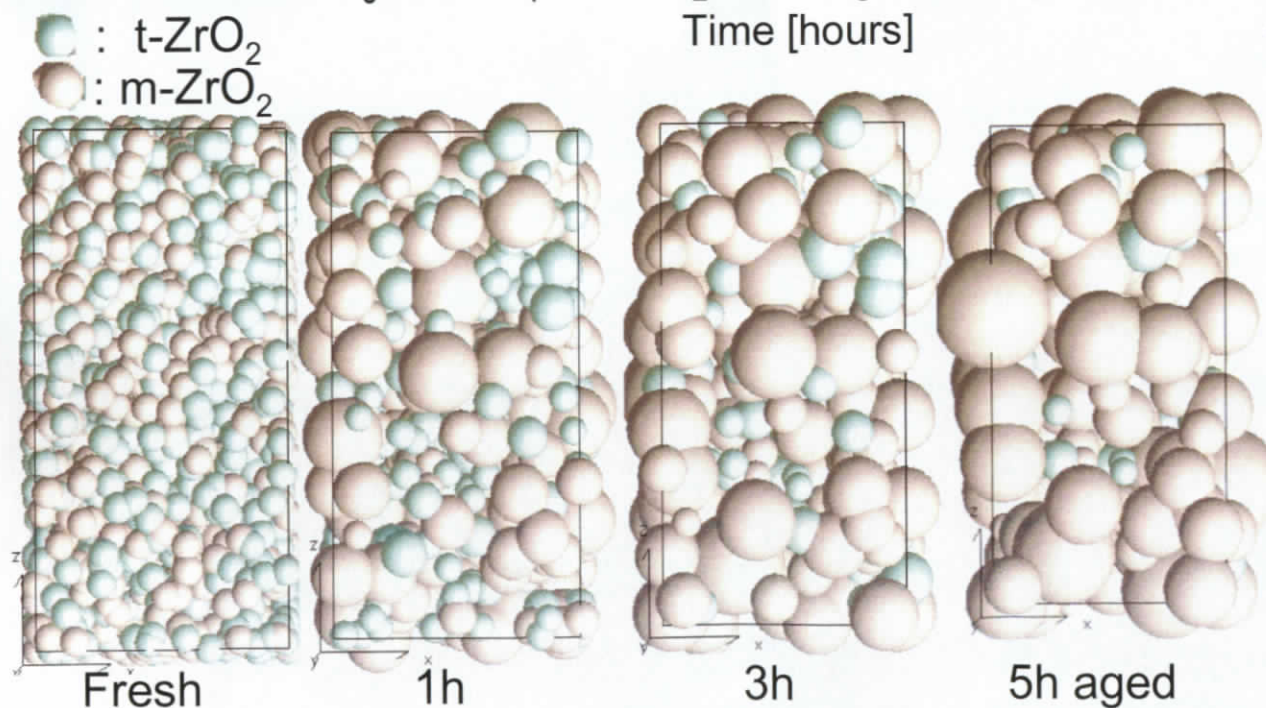
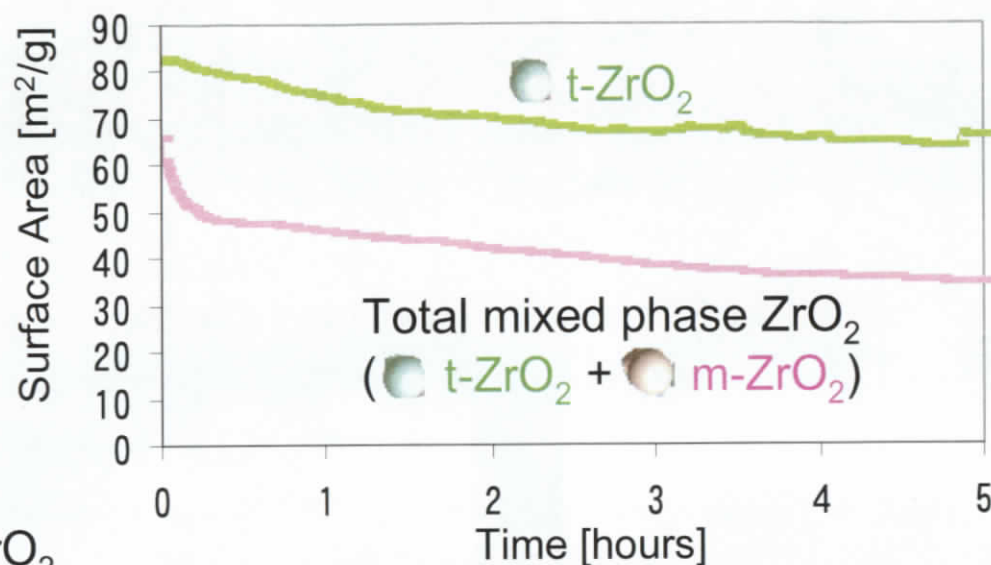
5 h aged

Pt/ZrO₂ Sintering Behavior

Experimentally estimated by CO pulse method



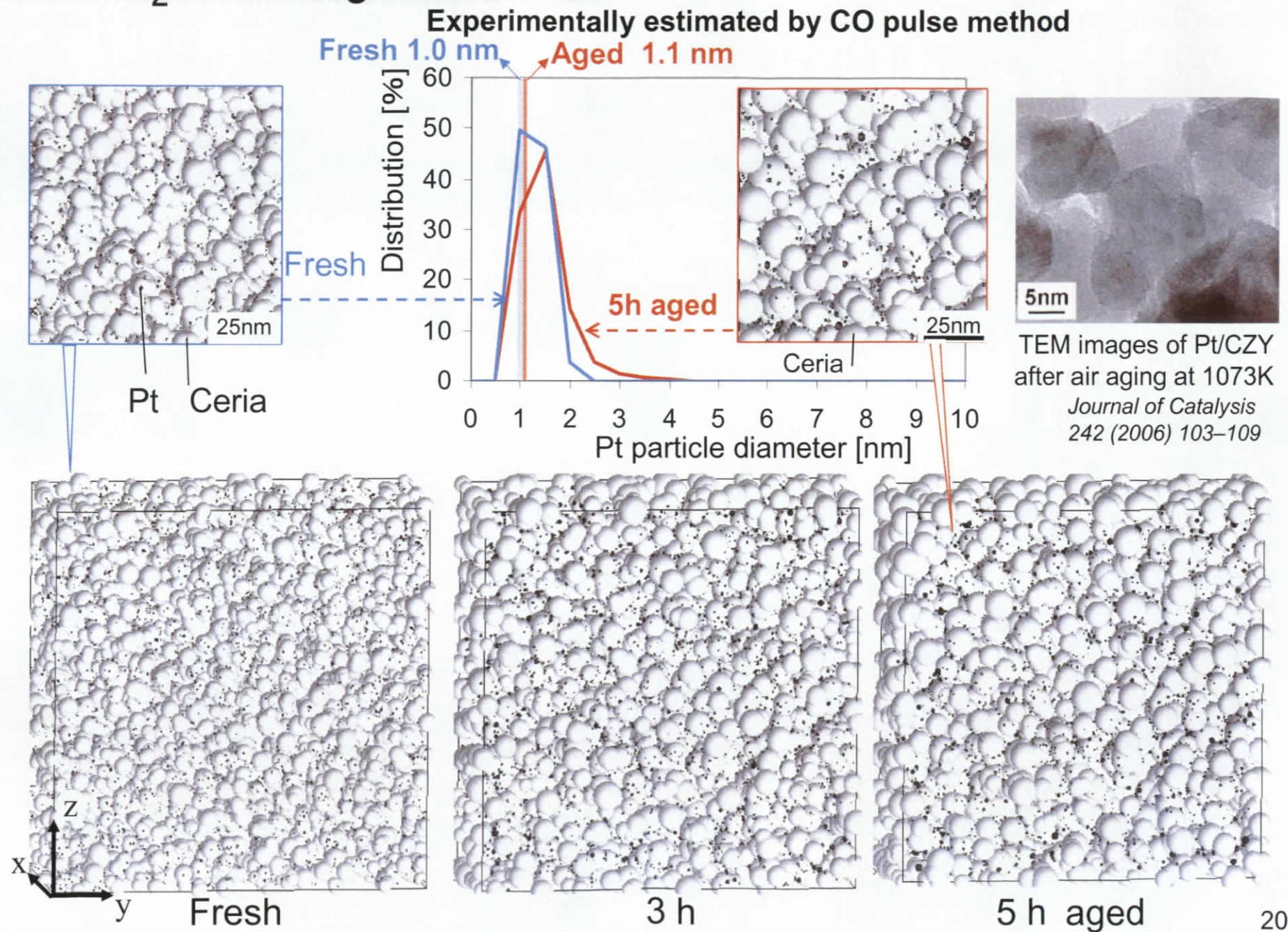
Multi Component ZrO_2 (t- ZrO_2 + m- ZrO_2) Grain Growth Behavior



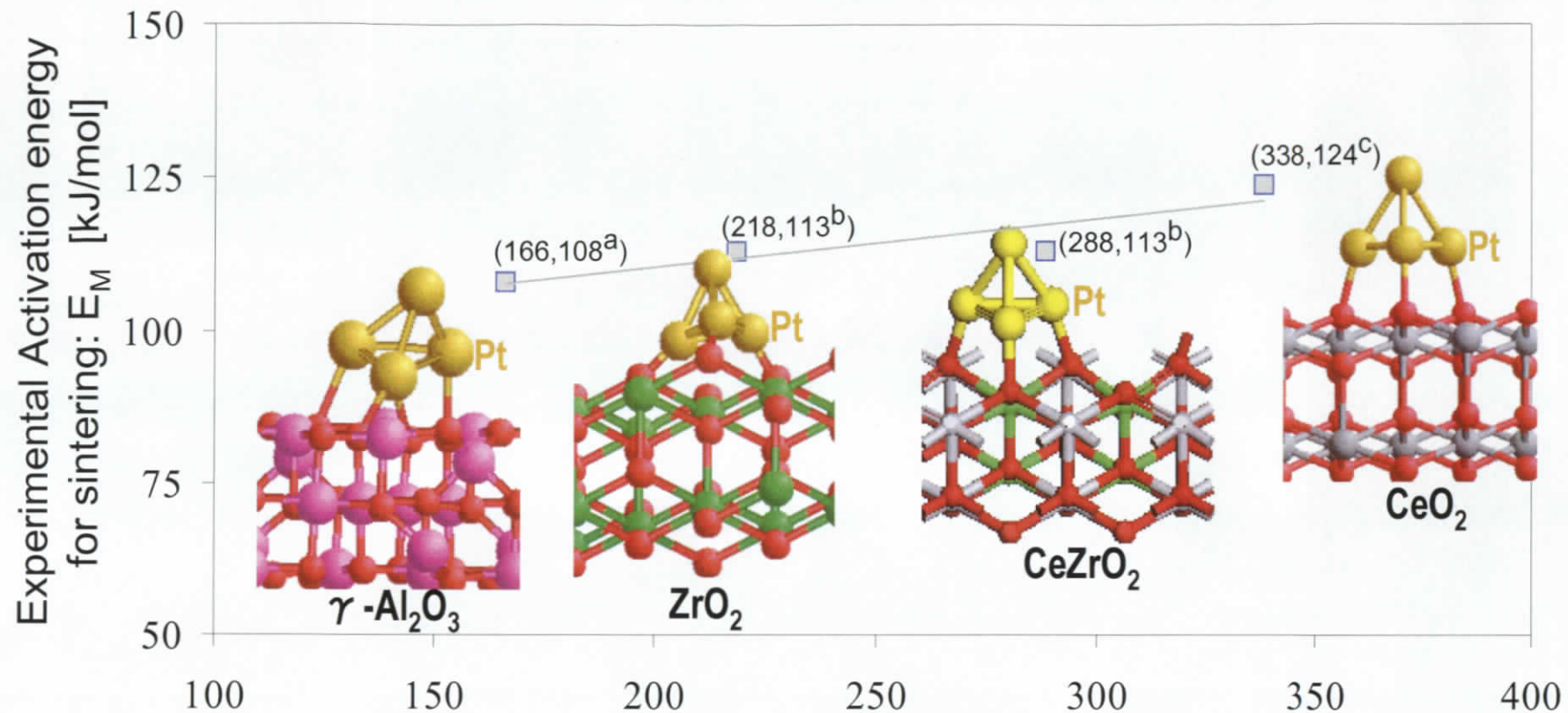
XRD of t-, and m- ZrO_2
versus crystallite size increase

Journal of solid state chemistry
149, 399 (2000)

Pt/CeO₂ Sintering Behavior



マイクロとメソ・マクロを繋ぐ量子論に基づく非経験的パラメータ予測



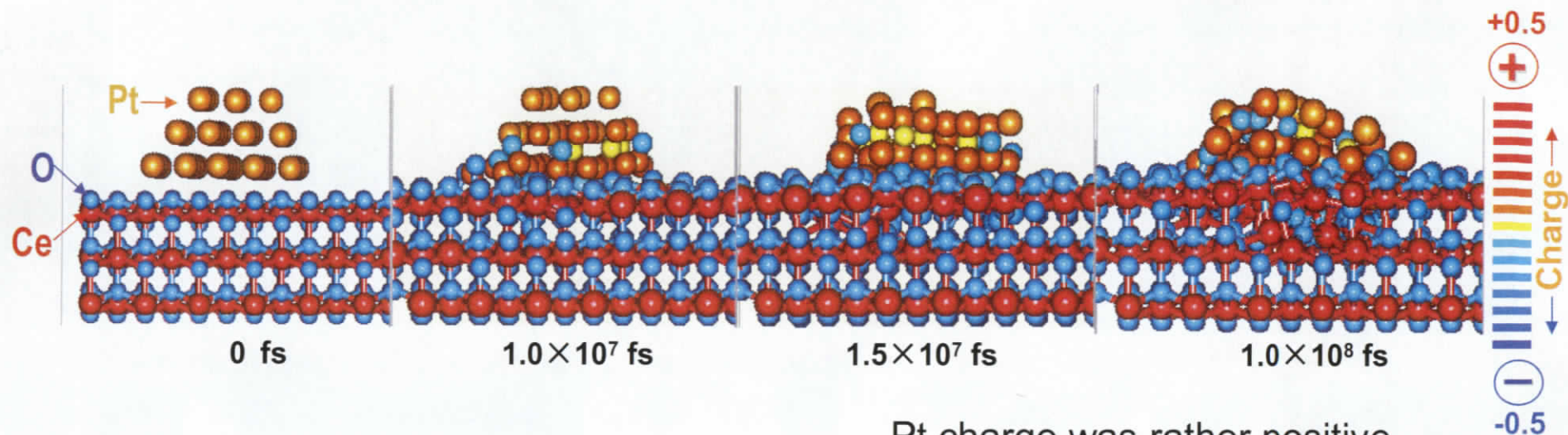
Pt4 Adsorption Energy on Supports [kJ/mol]
from Quantum Chemical Calculation :COLORS

a) Surface Science 566–568, 2004, 148–154

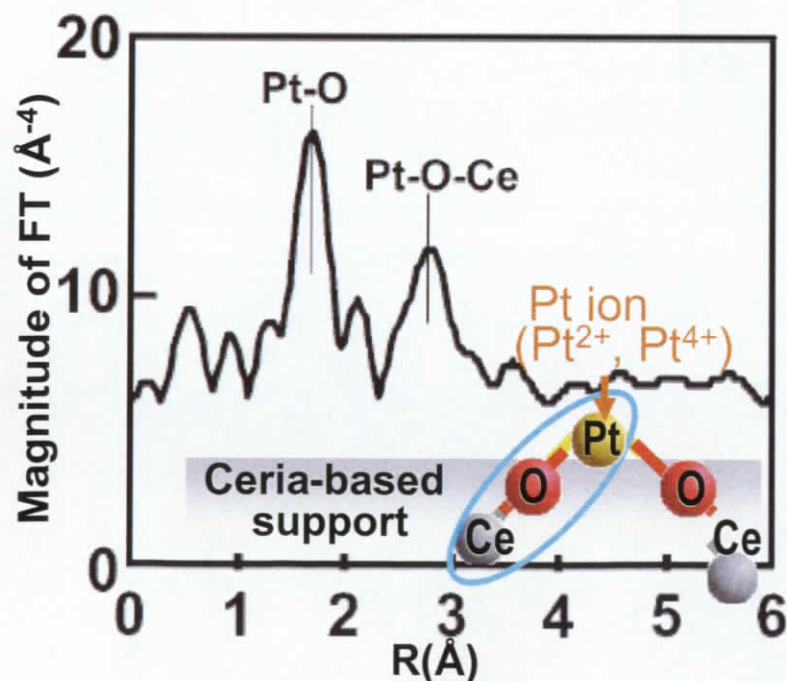
b) Applied Surface Science 236, 2004, 342–355

c) Applied Surface Science 135, 1998, 297–306

Charge and Bond analysis of Pt/CeO₂ (Oxidation Atmosphere) 1073 K



<EXAFS of Pt/CZY after 800 °C aging in air>

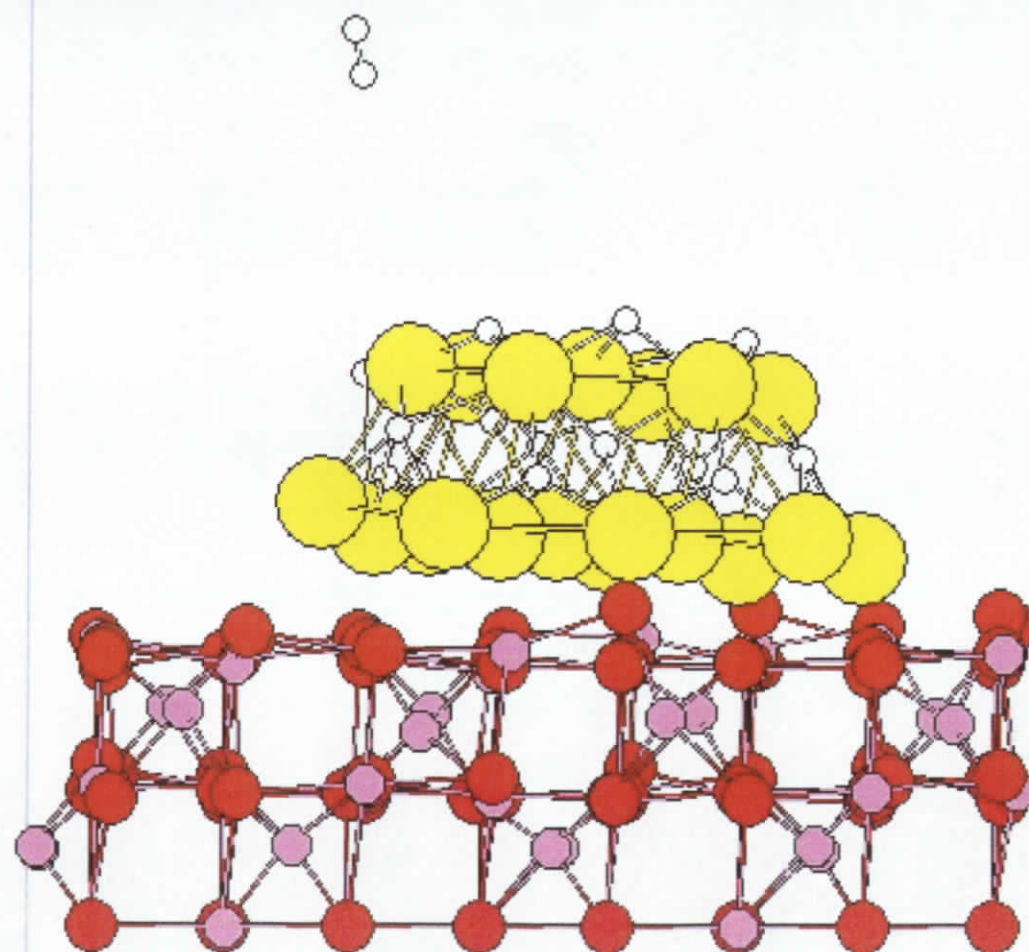


Bond	Length (Å)	Population (-)	Energy (kcal/mol)
Pt-O	1.94~1.99	0.27~0.45	66.72~103.95
(Pt)-O-Ce	2.33~2.42	0.10~0.17	19.28~32.63
Pt-Pt	2.67~2.70	0.099~0.18	15.76~30.68
Pt-Ce	2.72~3.10	0.02~0.04	2.43~7.11

Pt-O, Pt-O-Ce and Pt-Ce bonds were confirmed. It was agree with experimental result, EXAFS data.

貴金属の優れた機能の解明: 水素のスピルオーバー現象

どこまで貴金属を削減できるか

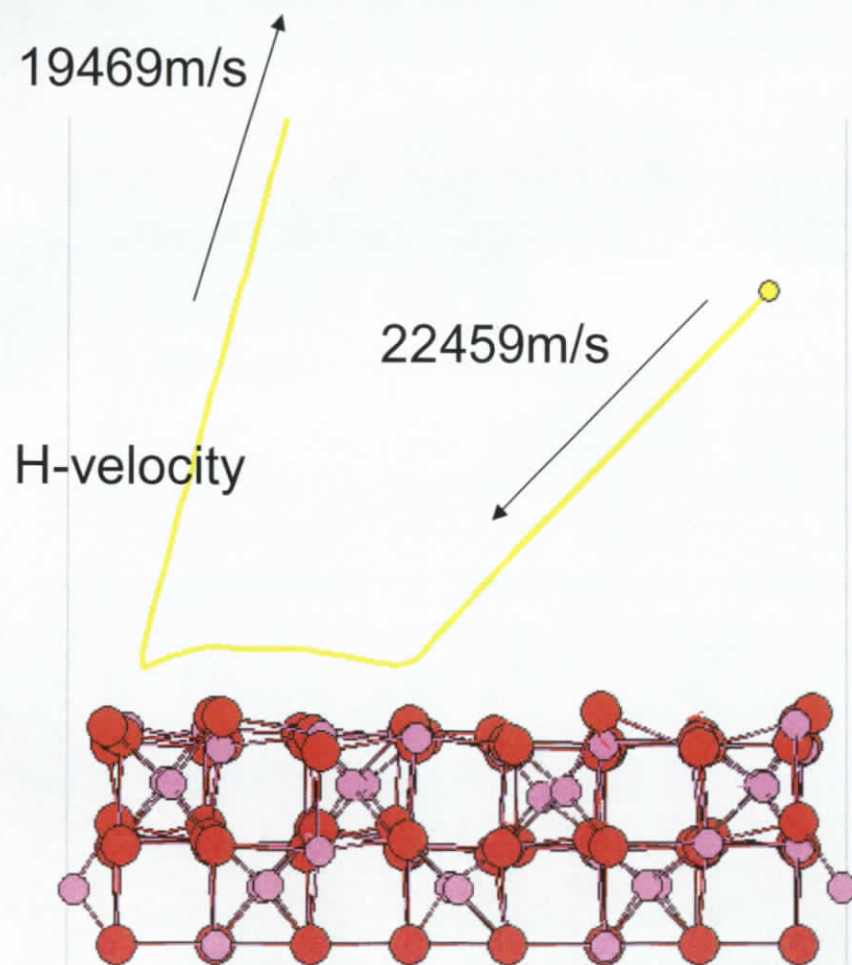


H_2 からの
原子状Hの生成

Pt_{19} cluster

Al_2O_3

Effects of $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ supports on H adsorption

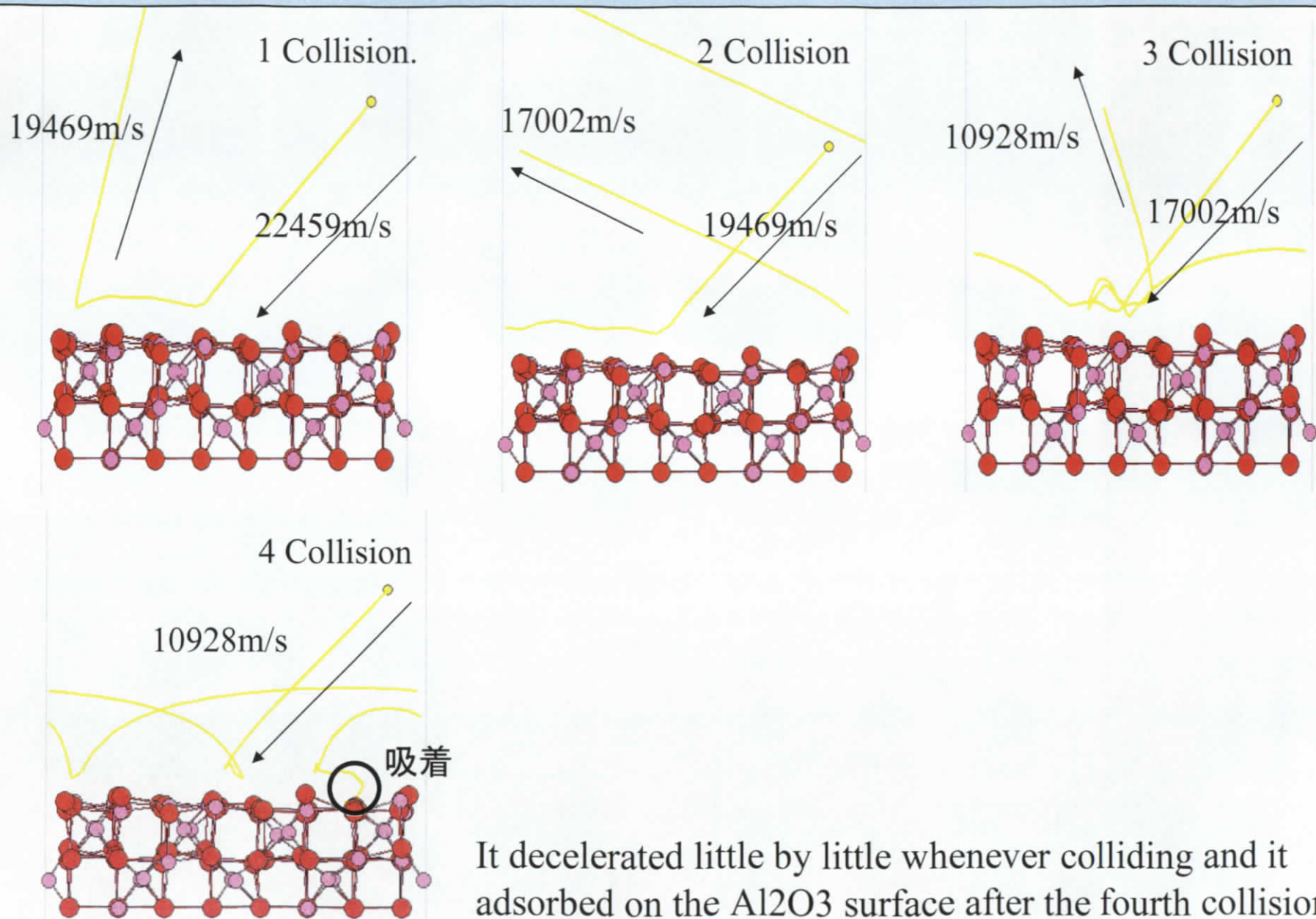


Parameter used between H-Al₂O₃

Morse 7.8[kcal/mol] 1.98[1/Å] 1.98[Å]

Initial rate of H
22459 m/s

MD calculation & adsorption of spillover H atom in Al_2O_3 surface

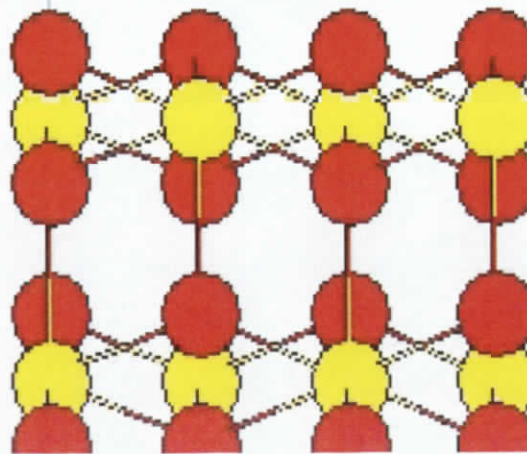


Movies

3900 m/s

Spilt-over
hydrogen atoms
are very reactive to
reduce CeO_2 and
produce H_2O and
oxygen vacancy.

CeO_2



H

O

Ce

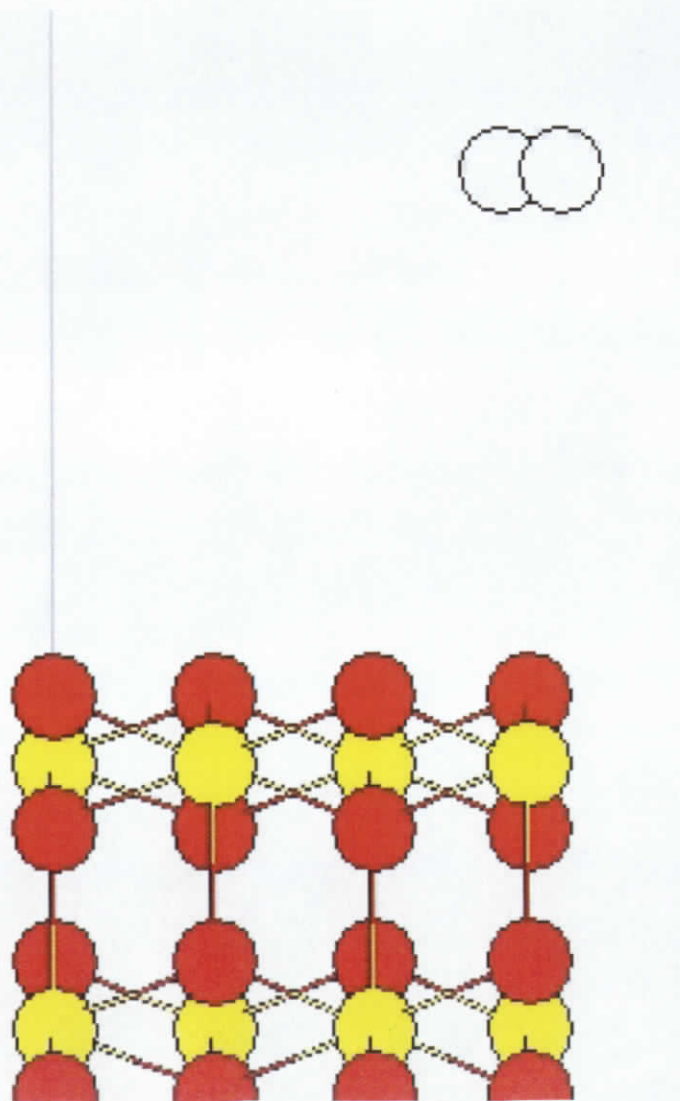
Movie

Molecular H_2
cannot reduce
 CeO_2 easily even at
a temperature as
high as 873 K

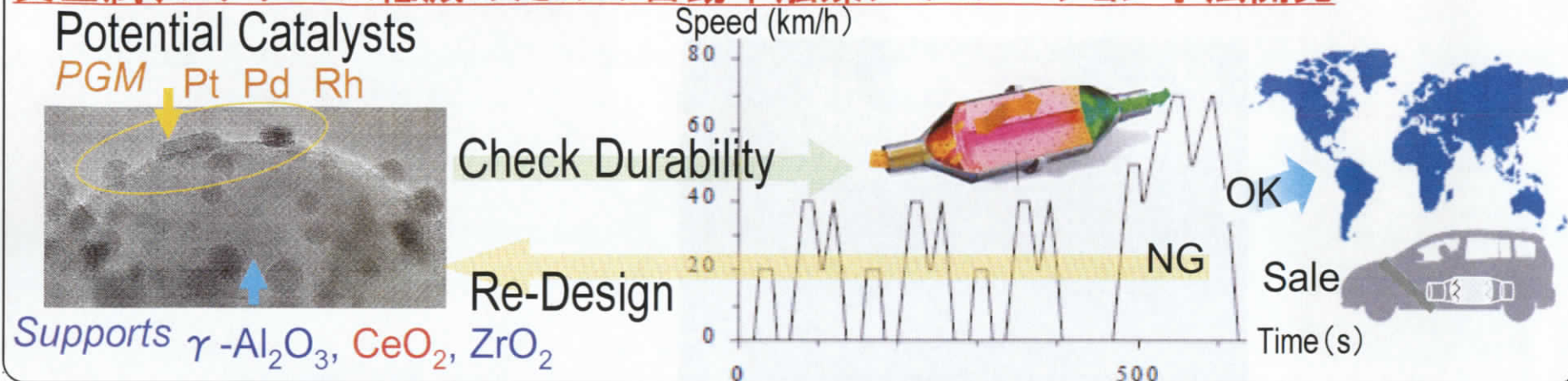
3900 m/s

CeO_2

H_2



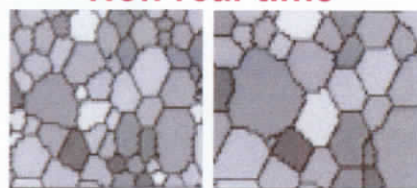
貴金属、レアアース低減のための自動車触媒シミュレーション手法開発



Theoretical Works Background

Static Monte-Carlo

Non real-time



50 MCS

100 MCS

Acta materialia 47-3, 1007, 1999

Molecular Dynamics

Too short "ps" for aging simulation



Computational Materials Science 14, 125, 1999

Surface Evolving Dynamics

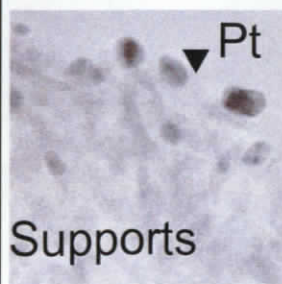
Unrealistically-simple



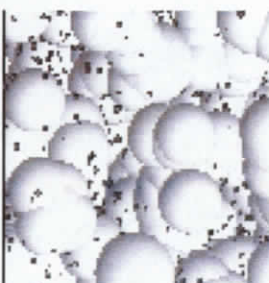
Acta Materialia 55, 4553, 2007

Aim

Multi-scale Simulation is applied for theoretical study on durability of catalyst.



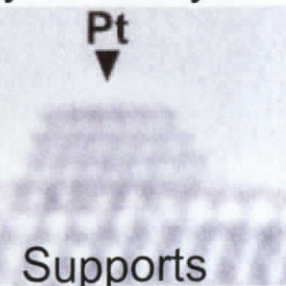
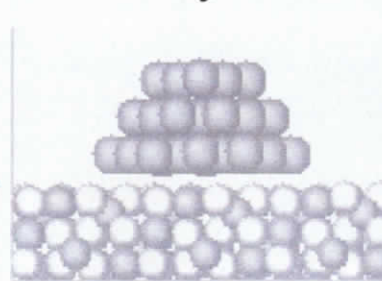
Supports



Macro \longleftrightarrow Micro

Sintering Behavior

Diffusivity



Supports

Kinetic Monte-Carlo

Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

コンピュータが創る新しい化学

1 実践的マルチレベル計算化学の方法論

2 産業技術(自動車技術)への応用

2.1 トライボロジー技術

2.2 触媒技術

2.3 蓄電池技術

3 Concluding Remarks

リチウムイオン二次電池用正極材に求められる性能

充 電

正極

負極

Li^+

現在、 LiCoO_2 が正極材に用いられている

コバルトは資源的に量が少なく価格が高い

↓
もっと安い金属を用いた正極材に変えたい。

Liイオンが速く動いて、構造変化が小さいもの。

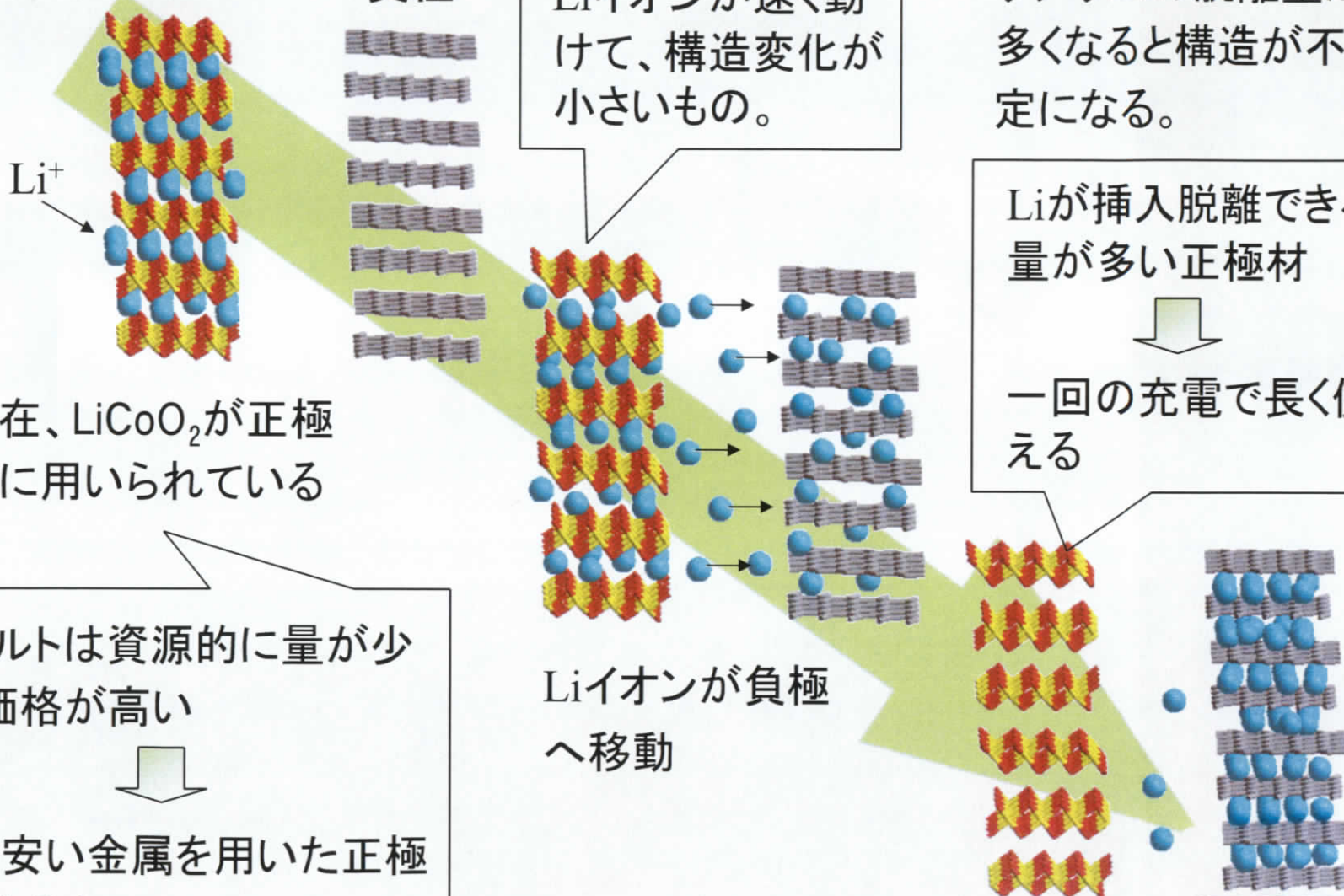
Liイオンが負極へ移動

リチウムの脱離量が多くなると構造が不安定になる。

Liが挿入脱離できる量が多い正極材

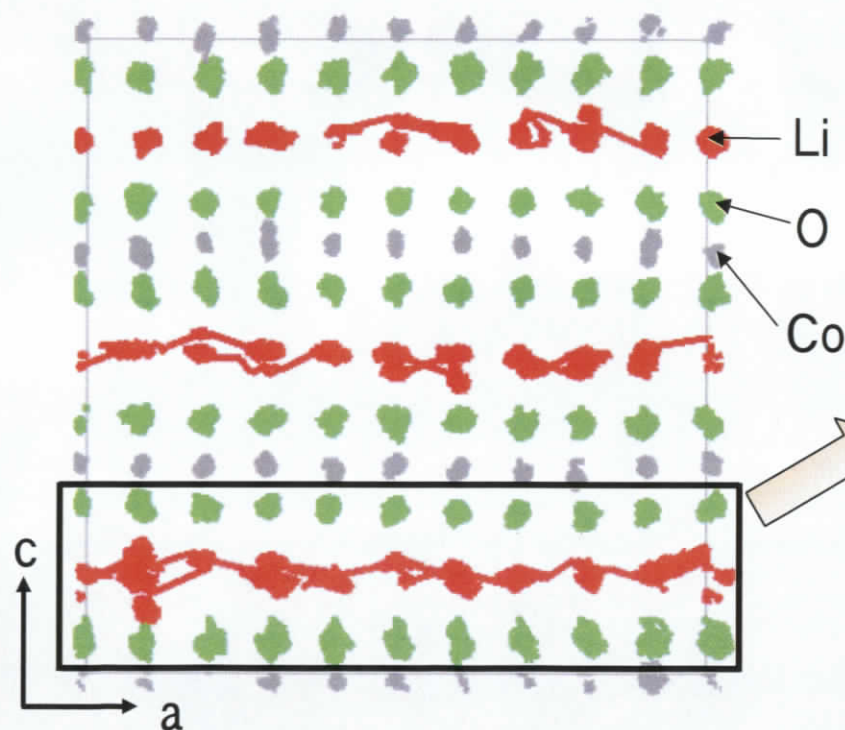
↓
一回の充電で長く使える

放 電

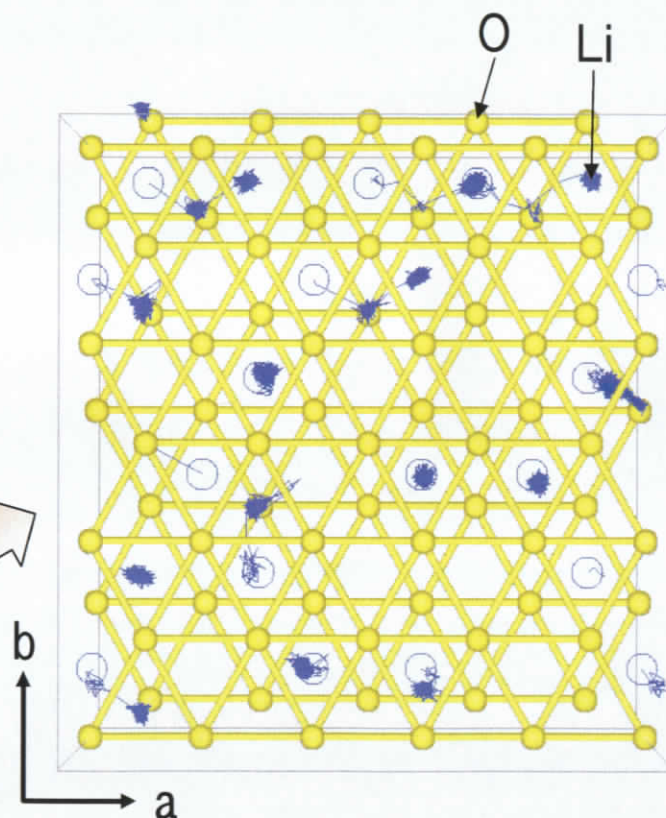


$\text{Li}_{0.5}\text{CoO}_2$ 中のLiイオンの拡散挙動

(a) 横から見た図

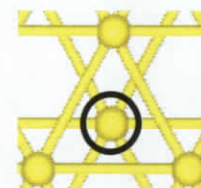


(b) 上から見た図

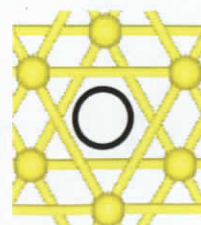


Liサイト

4面体
サイト



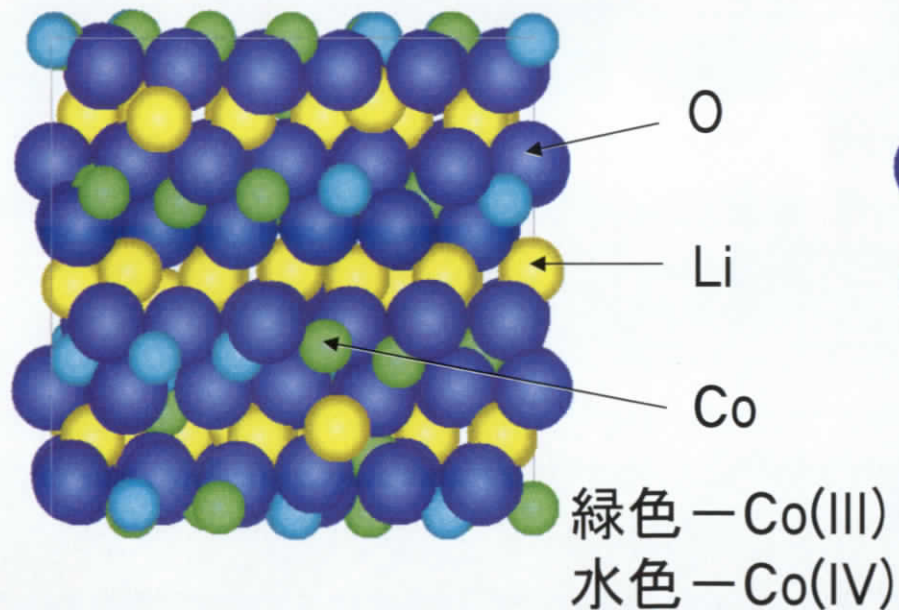
8面体
サイト



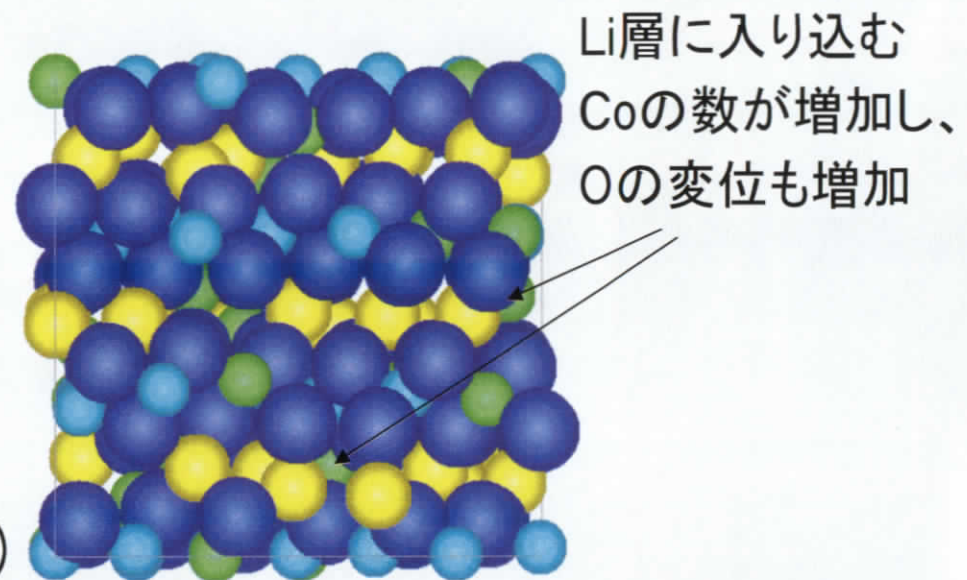
リチウムイオンは二次元方向に層間を拡散し、拡散する時は必ず4面体サイトを経由することが明らかにされた(8面体サイト間の直接移動は無い)。

Li_xCoO_2 中におけるLi量と構造変化の関係

$\text{Li}_{0.5}\text{CoO}_2$ の最終構造



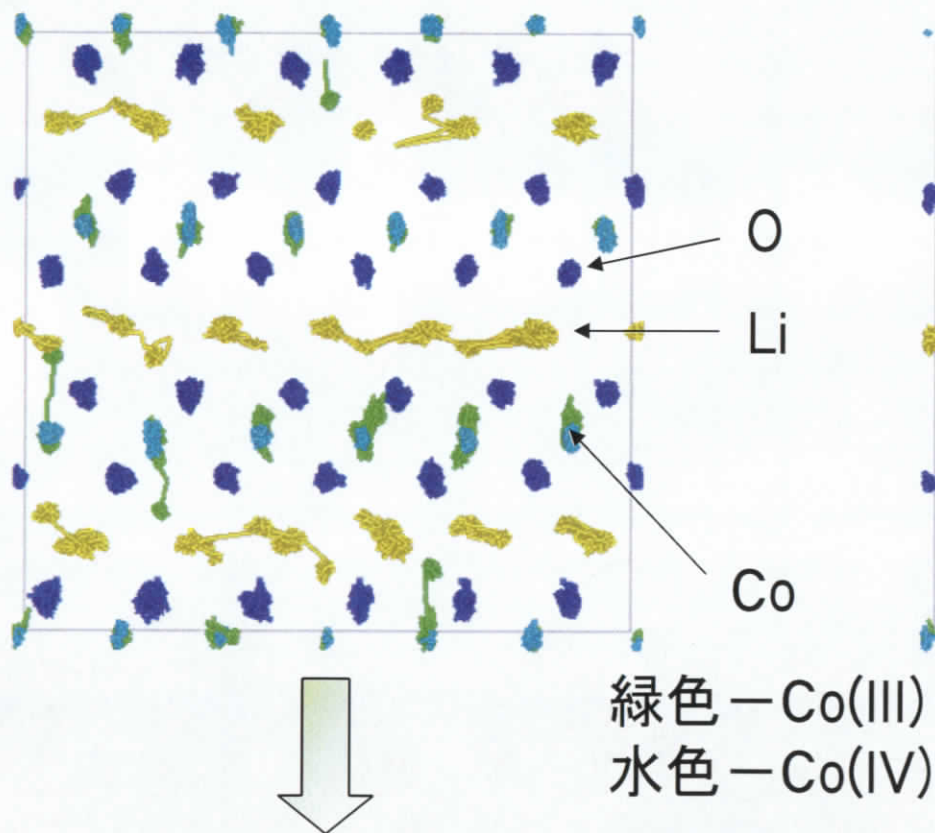
$\text{Li}_{0.4}\text{CoO}_2$ の最終構造



$x=0.5, 0.4$ の両方で層状構造は維持されているが、Li量が減少するにつれて構造が乱れる。

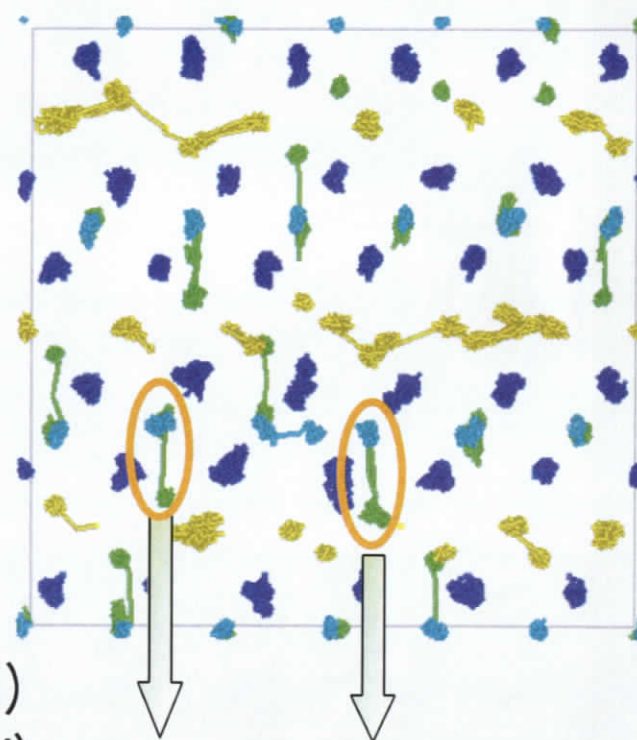
Li_xCoO_2 中におけるLi量と構造変化の関係

$\text{Li}_{0.5}\text{CoO}_2$ の各原子の軌跡



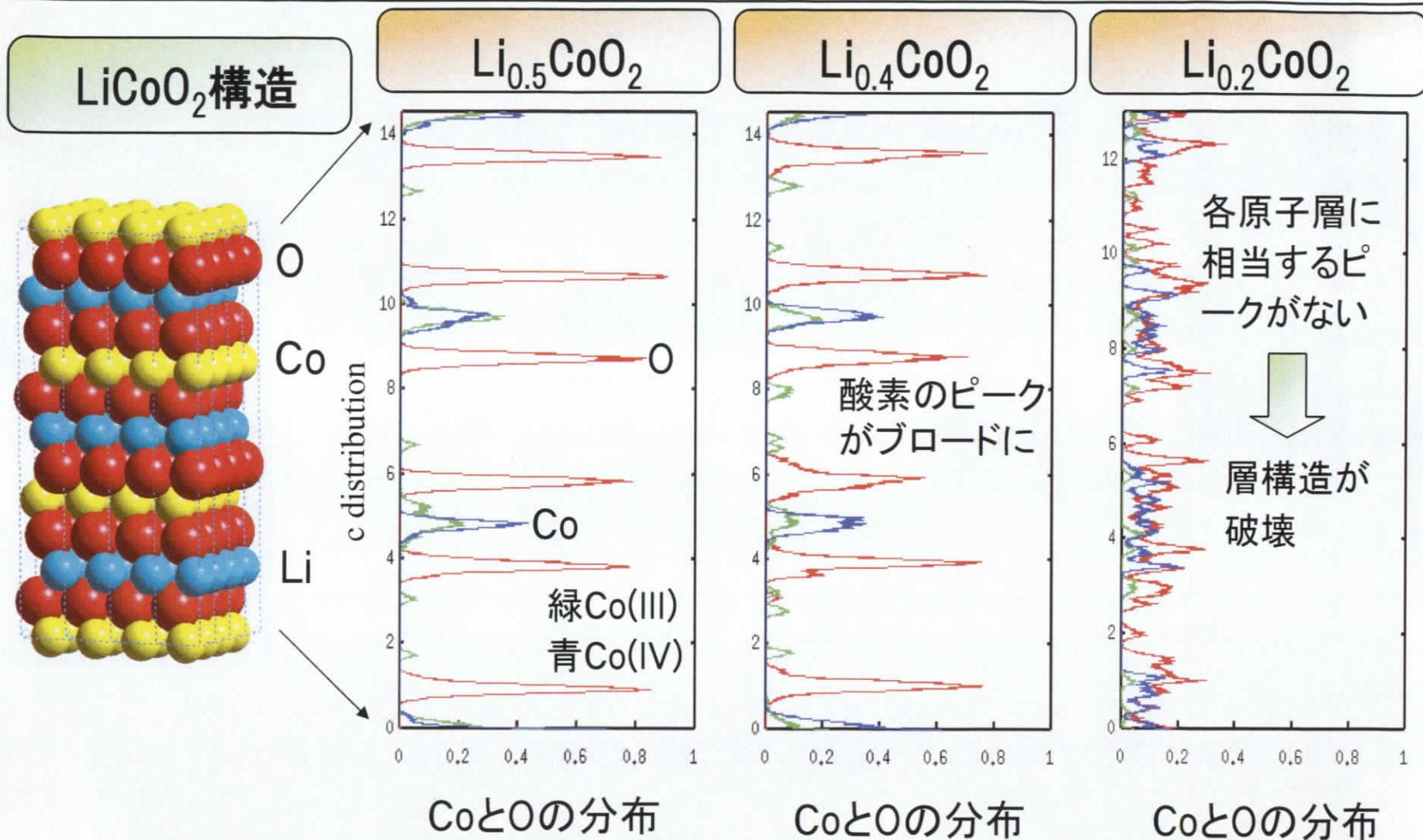
リチウムの2次元拡散が確認される。

$\text{Li}_{0.4}\text{CoO}_2$ の各原子の軌跡



コバルトのリチウム層への拡散が確認される。

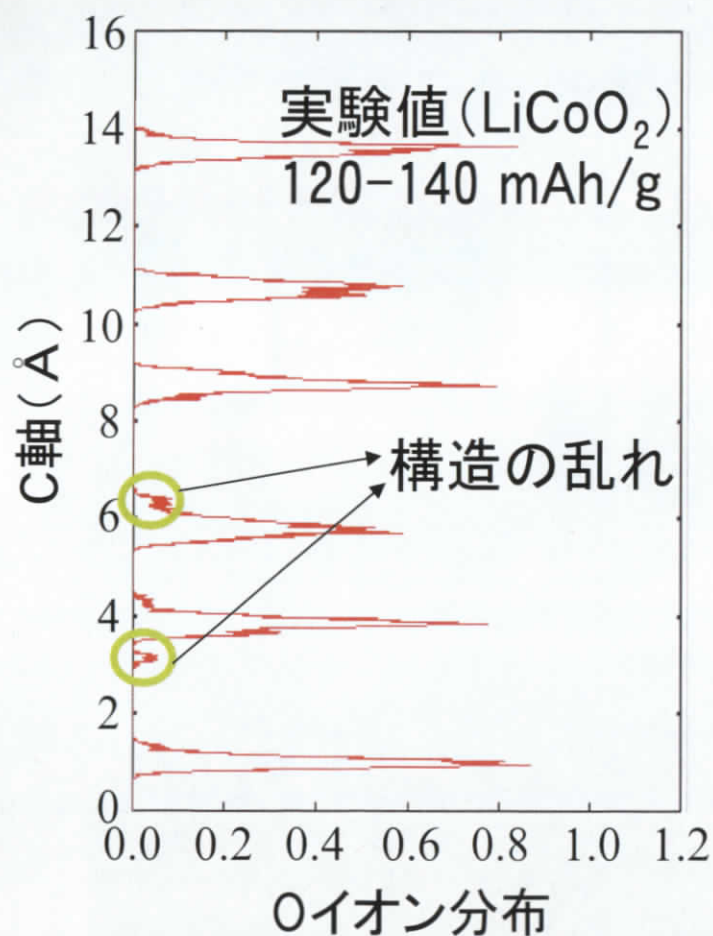
Li量の変化に伴う LiCoO_2 の層状構造の変化 \longrightarrow 実効容量の観点から



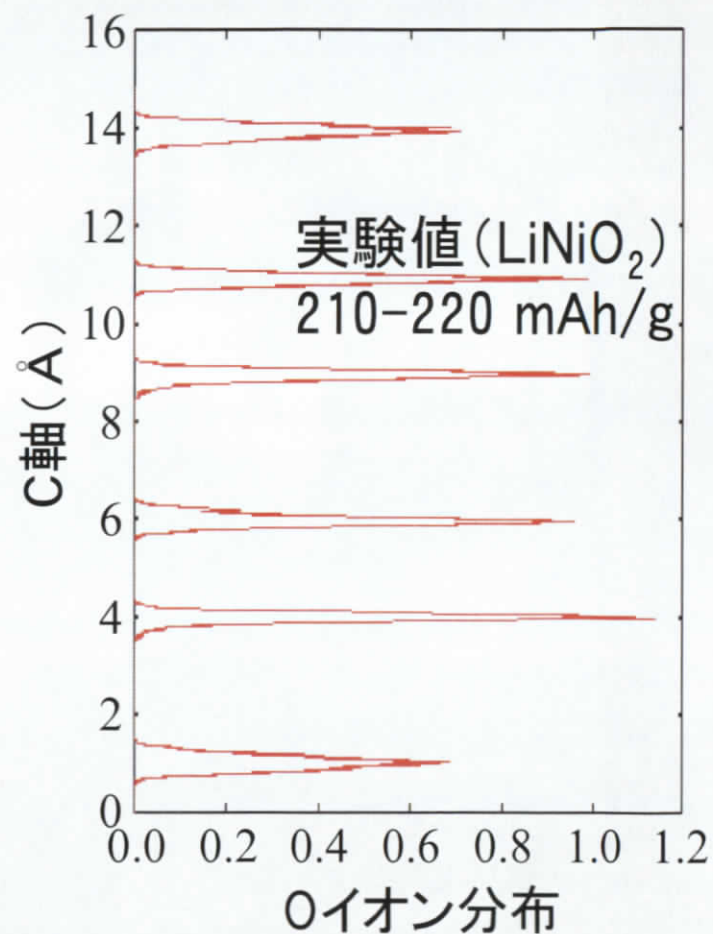
リチウム量 $x < 0.4$ で層状構造の乱れが大きくなり、 $x < 0.2$ では構造の破壊が起こる。

LiCoO₂とLiNiO₂におけるOイオンのc軸方向の分布

Li_{0.4}CoO₂のOイオン分布



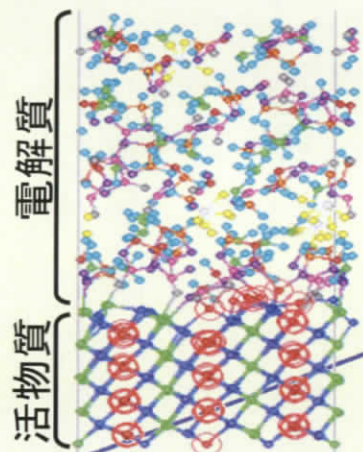
Li_{0.4}NiO₂のOイオン分布



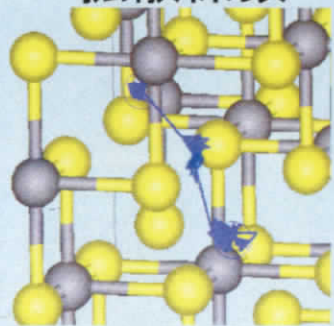
Li_{0.4}NiO₂の方が層状構造に乱れが少ないことから、LiNiO₂の方がより多くのLiを放出しやすく高容量であることが理解される。

実験融合マルチスケール計算化学によるリチウムイオン電池動的解析システムの開発

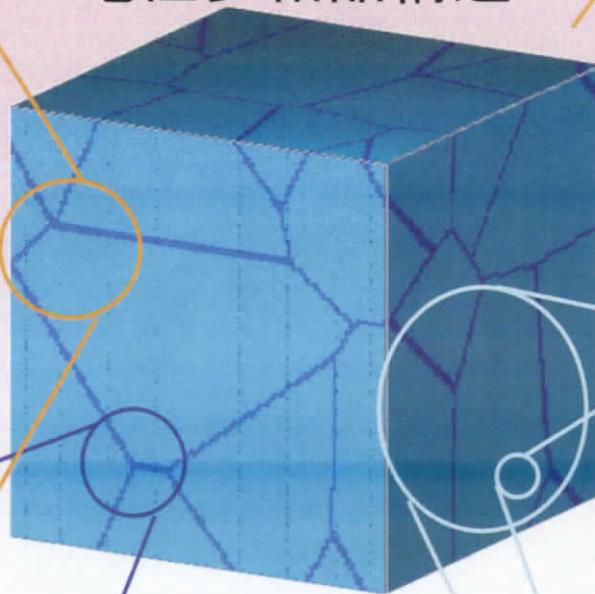
大規模量子分子
動力学法による
Liイオン拡散・反
応機構の解明



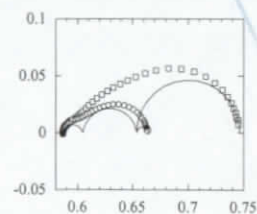
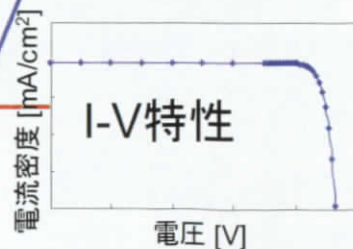
単結晶/多結晶
拡散係数



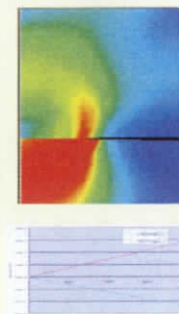
電極多結晶構造



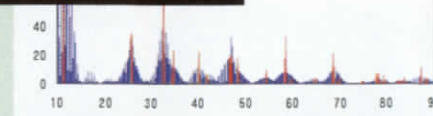
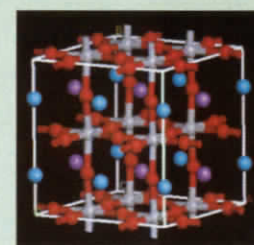
ミクロ物性・複雑な多結晶
構造に基づく実特性の
シミュレーション



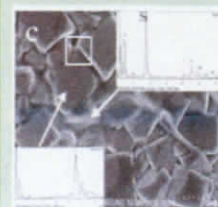
マクロ
熱・機械特性



本物構造の作製

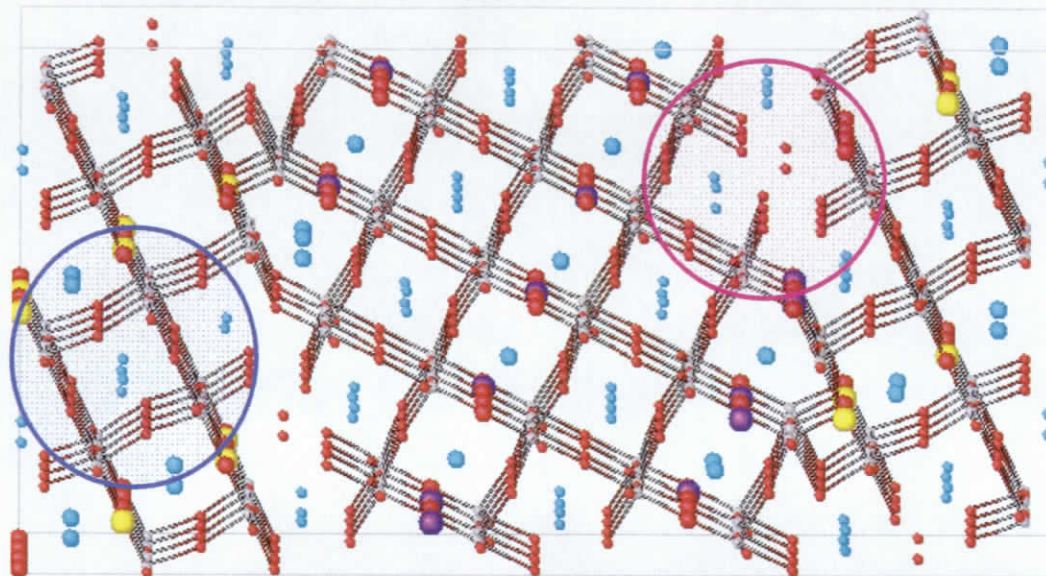


機器測定シミュレータ

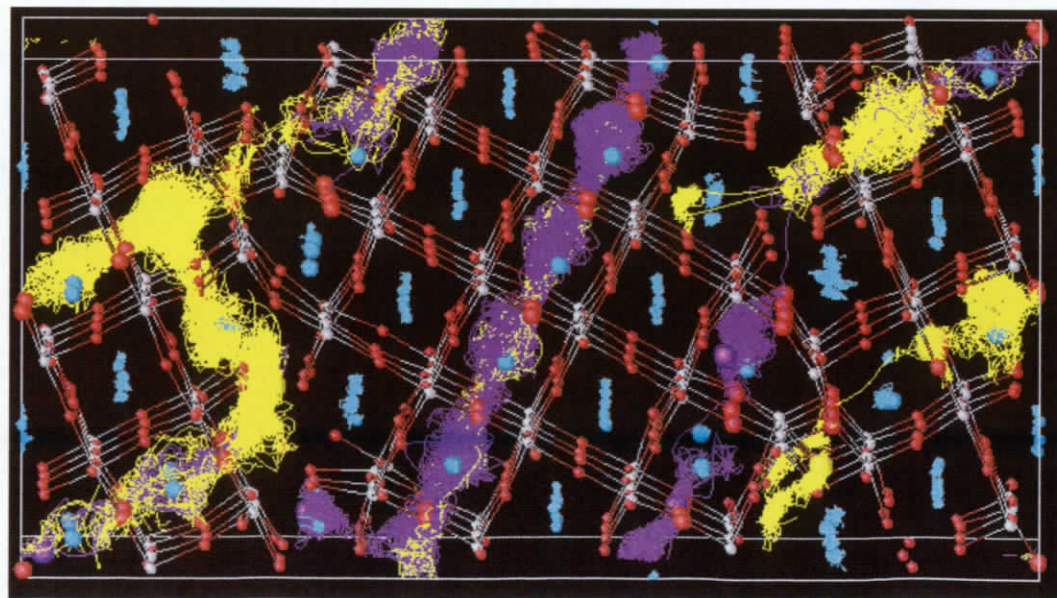


焼結シミュレータ

全固体電池におけるナノ界面の 超高速化量子分子動力学法シミュレーション



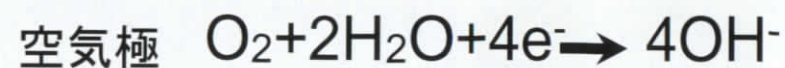
Li拡散は粒界よりもBulkに見られる
LiはLi Rich Layerに沿って移動している
粒界を越えてのLi拡散はあまり見られない
また粒界面の違いによりLi拡散に違いが見られる



○部
Li近傍の粒界にOが存在
直上のLa層には空孔が存在
→粒界付近でのLi拡散が見られる

○部
Li近傍の粒界にLaが存在

リチウム-空気電池(大容量蓄電)



理論電圧: 3.4 V

問題点

放電電流密度の低さ
0.01-20 A/cm²

- Li金属
- 有機電解液
- セパレータ
- 水溶性電解液
- 多孔質炭素
- 微粒子触媒

空気極構造を反映させたI-V特性
シミュレータを開発

リチウム-空気電池

実現には多くの困難があるが
大きな可能性をもつ

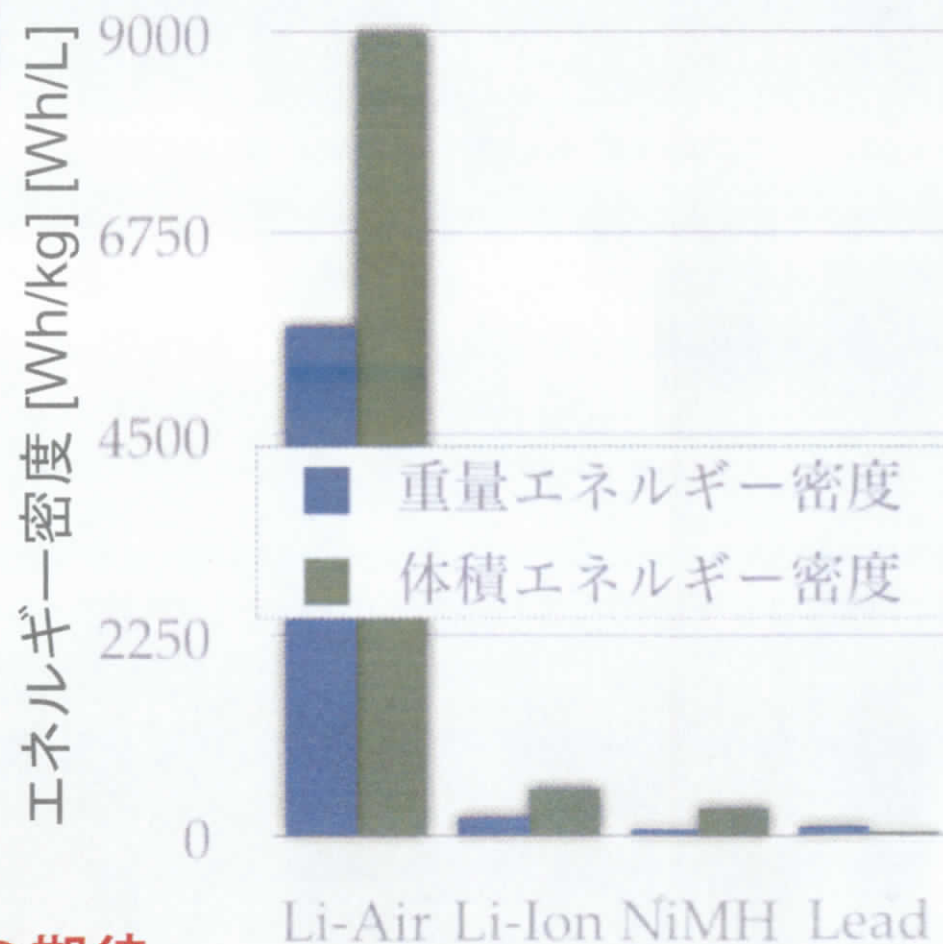
電気自動車用蓄電池の条件

- ▶ 大容量
- ▶ 軽量・小型
- ▶ 低価格

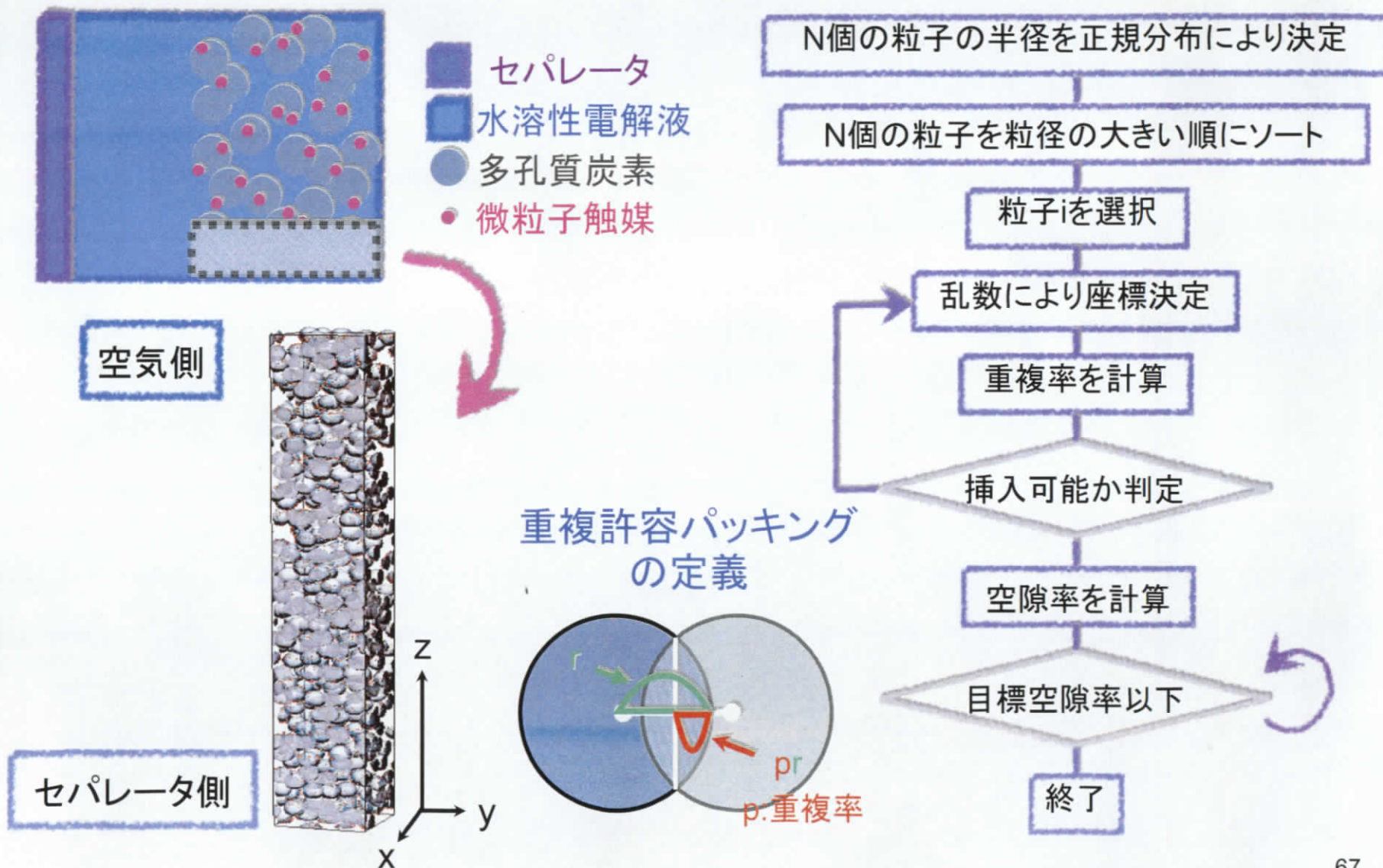
Li-Ion電池やNiMH電池は、
いずれにおいても不十分

→ ハイブリッドカー

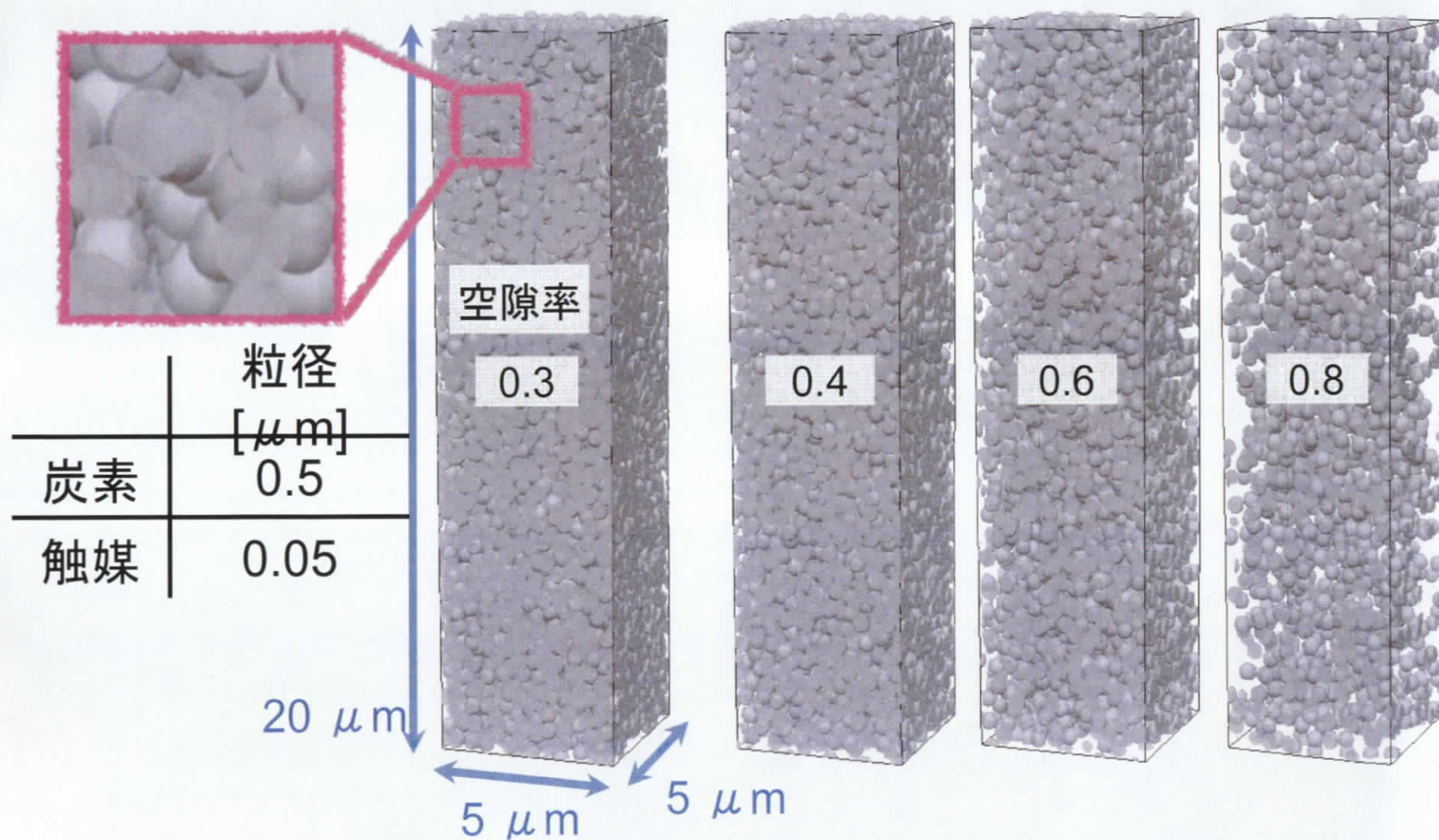
実践的コンピュータ化学への期待



三次元多孔質構造シミュレータ



空気極モデル



電流-電圧特性シミュレータ

仮定

- ▶ 空隙は水溶性電解液により満たされている
- ▶ 酸素・水溶性電解液の濃度は一定
- ▶ 電池内部は定常状態、温度分布なし

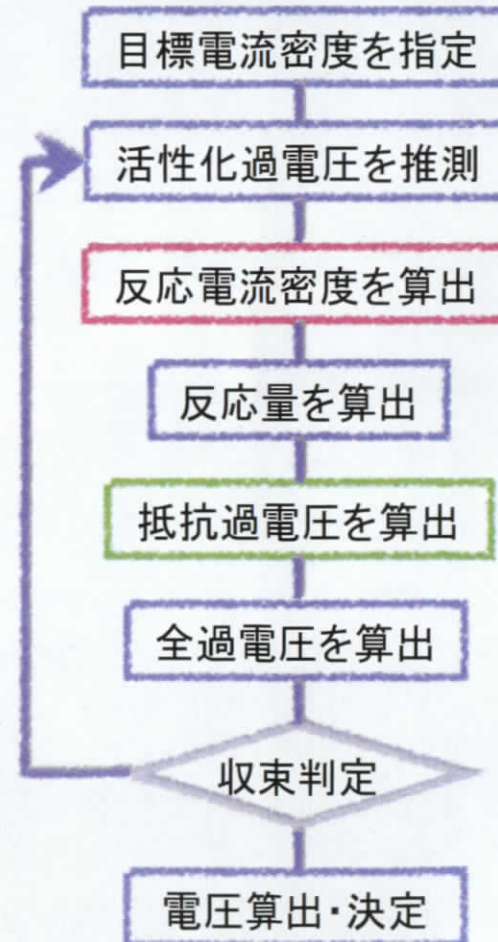
反応電流密度

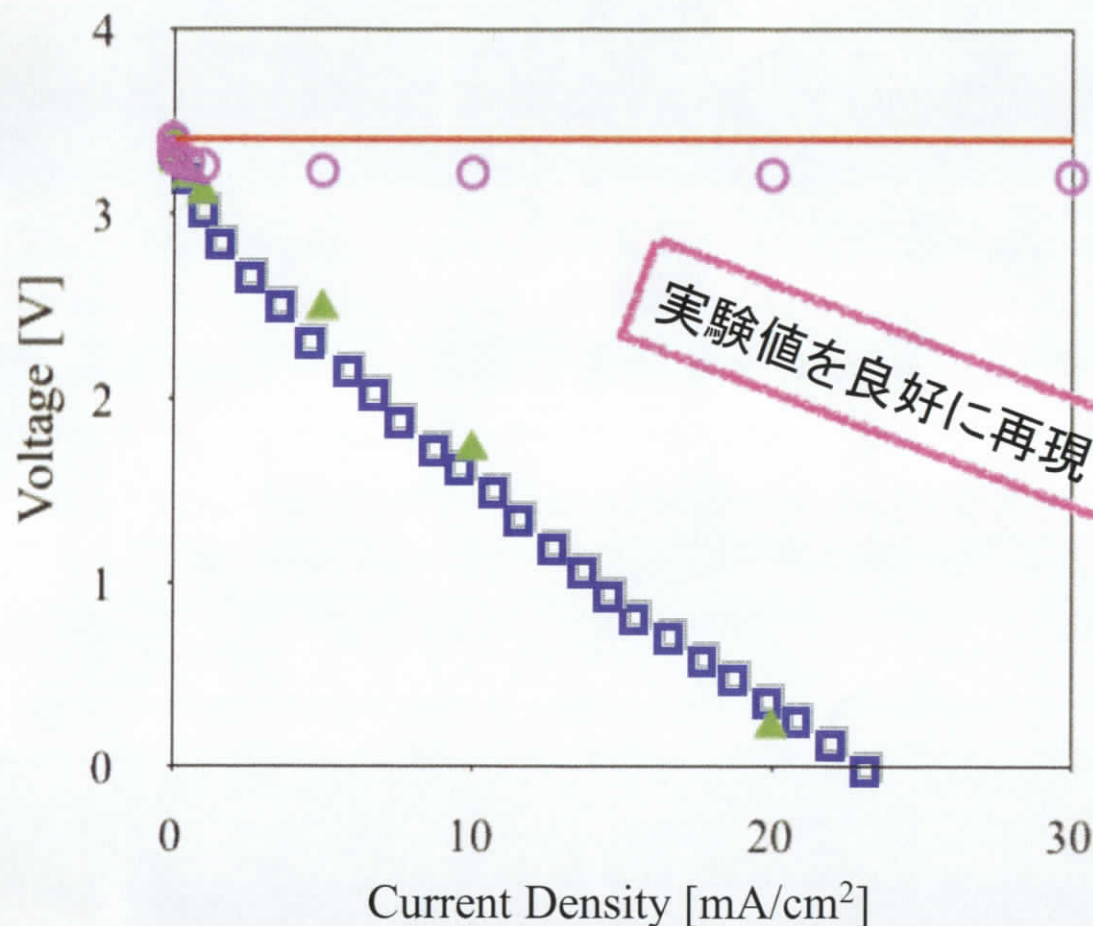
$$J_i = J_0 \left\{ \frac{C_{O_2,i}}{C_{O_2,ref}} \exp\left(-\alpha \frac{nF}{RT} \eta_i\right) - \exp\left((1-\alpha) \frac{nF}{RT} \eta_i\right) \right\}$$

抵抗過電圧

$$\eta_{Li^+} = \frac{J_{Li^+,i}}{\sigma_{KOH}} \Delta x$$

J_i : セル*i*での電流密度[A/m²], J_0 : 交換電流密度[A/m²], $C_{O_2,i}$: セル*i*での酸素濃度[mol/m³], $C_{O_2,ref}$: 理論酸素濃度[mol/m³], α : 対称因子[-], n : 電子数[-], F : ファラデー定数, R : 気体定数, T : 温度[K], η_i : セル*i*での活性化過電圧[V], η_{Li^+} : リチウムイオン伝導による抵抗過電圧[V], $J_{Li^+,i}$: セル*i*での電流密度[A/m²], σ_{KOH} : イオン伝導度[S/m], Δx : 電極厚み[m]





- 理論開回路電圧
- セパレータ考慮なし
- ▲ セパレータ考慮あり
- 実験値[1]

セパレータイオン伝導度
 $1 \times 10^{-4} \text{ S/cm [1]}$

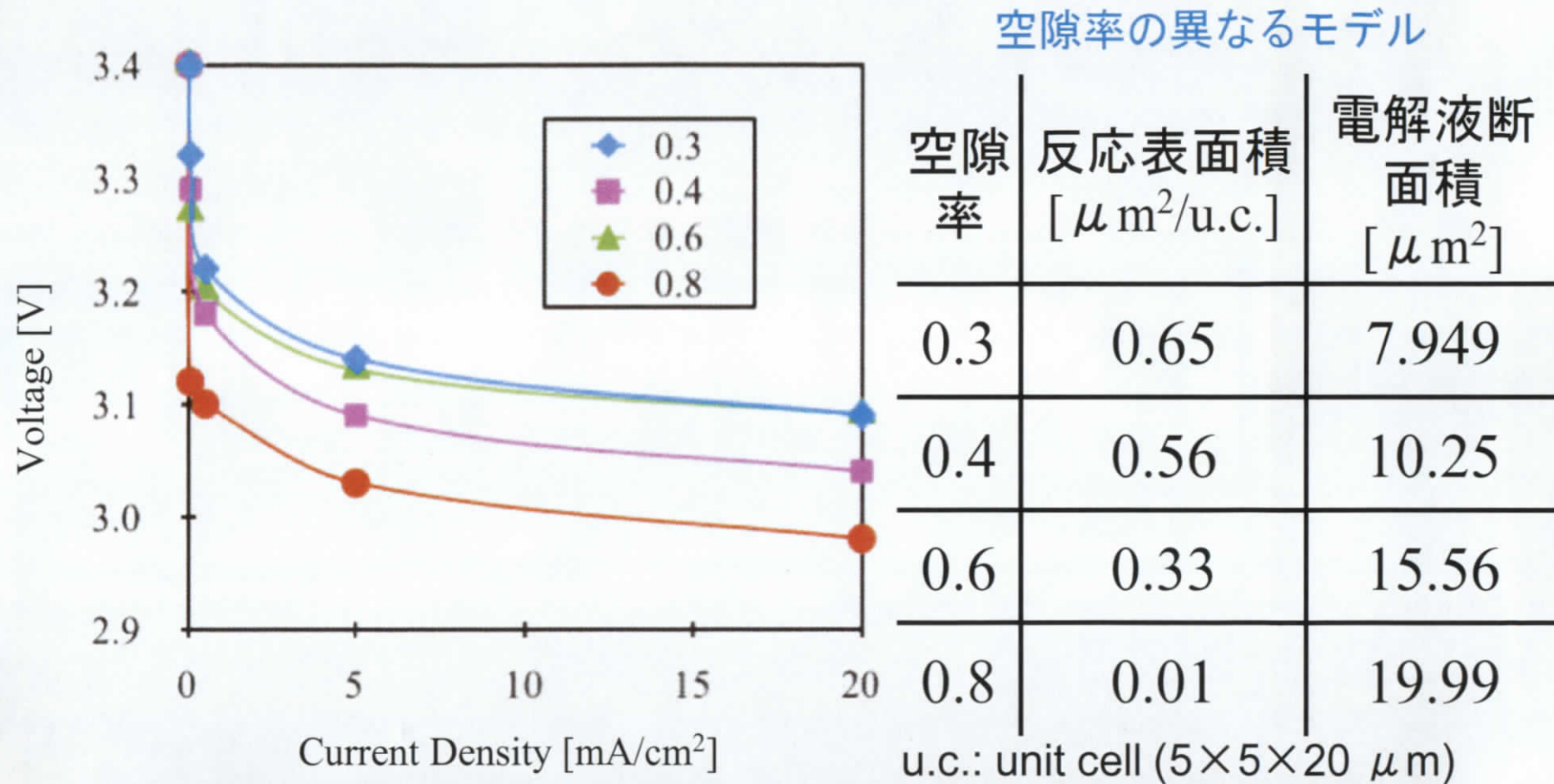
抵抗過電圧

$$\eta_{Li^+} = \frac{J_{Li^+,i}}{\sigma_{LISICON}} \Delta x$$

η_{Li^+} : リチウムイオン伝導による抵抗過電圧[V],
 $J_{Li^+,i}$: セル*i*での電流密度[A/m²], $\sigma_{LISICON}$: イオン伝導度[S/m], Δx : 電極厚み[m]

セパレータのリチウムイオン伝導を考慮することで実験値と一致
 セパレータに起因する抵抗が電池の性能に大きく影響

シミュレーション結果：空隙率の影響評価



性能と材料コスト面から空隙率0.6の空気極が優良
 反応表面積の減少⇒電解液断面積が広くなり過電圧が減少

Concluding Remarks

Integrated computational chemistry methods become more and more important for solving not only fundamental scientific problems but also complex industrial problems.

Challenges to complex industrial problems promote to create various theories, methodologies and softwares in computational chemistry.

私の研究観



東北大学教授 宮本 明

1 競争はできるだけしない

私自身、まだまだ新しい学問、生き方に挑戦する気持ちも強く、研究観を纏める年ではない。しかし、折角の機会でもあり、鈴鹿高専から東北大学への編入一週目に始まり、東北大学（学生時代）、名古屋大学（助手時代）、京都大学（助教授時代）、そして再び東北大学（教授時代）と種々の場所を巡り、さらに約一八年の触媒分野実験研究の後、コンピュータケミストリーに全てを賭ける転換をするなど多様な試行錯誤に基づいて体得した自分なりの考え方を紹介させて頂きたい。

研究には激しい競争のイメージがあるが、むしろ、如何に競争をしないかが重要と考えている。競争により互いを高いレベルに引き上げる効果はあるが、むしろその中でどのように独自領域を創るか、世界中の誰にも代えられない独自性のある研究者を目指す視点が肝要である。

2 残り物に福がある

人間の知恵というのは、相当優秀な人でも、

時間的、空間的にかなり限られた範囲しか覆えない。特に、現在、目の前に有望な対象があるときに、たとえこれが禁断の果とわかっていてもそれを採らないことは難しい。研究テーマでも、他の研究者が先に取ったテーマよりも、最後に止むを得ず残ったテーマの方が案外将来性ある重要テーマに繋がることが多い。自分自身でも、環境触媒やコンピュータケミストリーに出会ったのはそのような契機からである。ただ、必要なのは、そのテーマにもつ意味をよく考えて、そこに潜む歴史的、学問的、社会的な意義をしっかりと捉え、精一杯の努力を傾注することだけである。

3 火のないところに煙をたてる

研究に携ると、最初は他に研究例があったとしても、いずれ未踏の領域に辿り着く。その時の対応が、研究者としての成否を分ける。そこで、不安になって先に進めないようなら、もう少し修行が必要と思う。そこで、自分が新しい道、新しい領域を創っているのだ、それが将来大きく広がるのだ、という感慨、緊張感、責任感、誇り、喜びを楽しむことを若

い研究者には是非覚えて欲しい。物質的に豊かになり、人生に大きな夢を抱けなくなったと言われる今日の先進国社会においても、研究にはまだ全くの未開領域が多く残され、上のような達成感、充実感、生き甲斐を感じ取ることができよう。

4 成績の悪い人ほど有望

大学の教官をしていて驚くことは、いわゆる成績のよい学生の多くが、保守的で、いかに先を見る目がないかと言うことである。考えてみれば、研究面だけでなく大きな成果を挙げている人の中には、意外に、回り道をした人、要領の悪い人、遊んでいた人も多いのではないか。成績の悪い人は、過去に頼るべきものもなく、研究に頑張らなければとの気持ち強い。それだけ、新しい研究を創出する素地ができているものと考えて研究室を運営している。幸い、そのような学生が大活躍している。

5 難しいが自己革新に挑戦する

新しい場所に移って、三年～五年位は無我

夢中に新しい研究に取り組むが、七年から一〇年以上も同じところにいると、どうしても緊張感、感激が乏しくなりマンネリ傾向になつてしまふ。私自身は、幸い、七～一〇年毎に移動したので、あまり深刻な経験はないが、その徴候は実感した。最も難しい問題であると思う。特に、一つの分野で相当な成果を蓄積している場合に困難が大きくなる。古い殻を破り、夢中になつて新しい自分に挑戦することは結構楽しいものである。

6 賛成者が多いようなことはやらない

若い研究者にとって問題なのは、陽の当たる分野が好きであることであらう。自分の発表を多くの人が注目し賞賛するとその分野から離れられなくなる。発表しても誰も聞いてくれなかったり、無視されたりするとやる気をなくしてしまう。賛成者、賞賛者の多いような研究は往々にして既に成熟分野となり、大きな発展が期待できない場合が少なくない。むしろ、自分のことを真剣に心配してくれる人でさえ反対するような未開拓の分野に挑戦することが新しい研究の発展、飛躍に繋がる。

7 まず持っているものを捨てないと、新しいものは掴めない

何もかも得ようとする、結局何も得られない。研究面でも同じではないかと考えている。新しい研究をしようとしたら、これまで大切に育んで来たものでも思い切り捨てないと新しいものは掴めない。六年前、東北大学で新しい研究室を開設するとき、古くから残っていた実験装置は、全て捨て去ることから始めた。それにより、触媒、表面・界面の計算化学という新しい領域が開拓できることを期待したからである。背水の陣を敷くことにより、困難でも前に進まざるを得ない体制ができたものと考えている。今でも約三〇〇人のメンバーがこの分野に賭けている。

8 一番の幸せは、人々に喜んでもらえること

研究者にとって新しい研究のブレイクスルーが達成できた喜びは大きい。ちょうど、オリンピックの金メダルを受賞した時のよう



な感激であろう。同時にそれが多くの人の幸に繋がった時には、喜びが倍加する。その意味で、工学研究に私は魅力に感じている。計算化学を飛躍的に発展させて、環境問題、資源エネルギー問題、食料問題、先端材料開発などの解決にもっともって役立てたい。計算化学を活用する強力な工学体系を構築したい。新しい研究にかける夢は膨らむ。

計算化学（コンピューターケミストリー）という言葉をご存知でしょうか？

お料理を例えにしてご説明してみましょう。材料AとBとC、調味料dとeとfで、今まで作ったことがない創作料理を完成させてレパートリーを広げたい、とします。材料AとBを炒めて調味料fで味付けし、そこにさつと茹でた材料Cを合わせて調味料eで仕上げるとうまいきそうだと予想します。さっそく調理開始！でも現実には厳しくて、お味はイマイチ。材料「AとB」を茹でて「C」を炒めたほうがよかったかもしれない、調味料「f」ではなく「d」のほうがよかったかも…でも、材料は使い切ってしまった、もうやり直しはききません。創作料理の誕生には「悲話」がつきものです。材料と調味料の各特性と自分の食べたいもののイメージ（辛いとかさっぱりとか）をコンピューターにインプットして、シミュレーションさせ、最も効果的な組み合わせと調理法を導き出してくれたら、「悲話」もなくなるのに…計算化学のねらいを簡単にいうとこんな感じです。

企業研究会には現在、25の常設共同研究部会が活発な活動を続けていますが、その中に、計算化学に興味を持つ研究者が集う「CAMMフォーラム」があります。CAMMとは聞き慣れない言葉ですが、これは「コンピューターによる材料開発・物質設計を考える会（Computer Aided Materials and Molecular Design Forum）」の略称で、企業研究会のオリジナルです。この分野の歴史は世界的には約30年、日本では約10数年といわれており、CAMMフォーラムは現在第12期ですのぞ知る人ぞ知る「老舗」なのです。

メンバーは約70名の産・官・学の研究者。月に一度の例会は自主運営の分科会とメンバーが一堂に会する本例会で構成され、4つある分科会では共同開発したソフトウェアを日本化学プログラム交換機構に公開したり、ワークブックを出版したりと成果を上げてきています。本例会では、この分野の最新トピックスの講演や、理論の講義などが行われています。

マネジメントの問題を扱うことが多い企業研究会の中ではちょっと異色な集団なことと、参加人数が多くてコミュニケーションをとるのが大変なこと、メンバーの専門分野が化学・物理・バイオと多岐に渡っていること、などから機関誌の発行を希望する声が高まり、「忙しい研究の合間に、コーヒー片手に鼻歌交じりで読めるような肩の凝らない読みもの」として1991年3月に「CAMM NEWS」が誕生し、半年に一度というのんびりしたペースで発行を重ねています。巻頭言では、この分野の著名な方々に「私の研究観」をお願いしており、毎回好評を博しています。今回の宮本先生のご高見は最新の第15号からのものです。計算化学に限らず、研究開発や新規事業に携わっておられる方々に共通する思いではないかとご紹介させていただきました。